



**Уральский  
федеральный  
университет**

имени первого Президента  
России Б.Н.Ельцина

**Институт  
материаловедения  
и металлургии**

**Н. Г. АГЕЕВ**

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ

Учебное пособие





Министерство образования и науки Российской Федерации  
Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

Н. Г. Агеев

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ

Учебное пособие

Рекомендовано методическим советом УрФУ  
для студентов, обучающихся по направлению подготовки  
«Металлургия»

Екатеринбург  
Издательство Уральского университета  
2016

УДК 669:004.94(075.8)

ББК 34.3вбя73

A23

Рецензенты:

завкафедрой канд. техн. наук, проф. *В. А. Линьков*, д-р техн. наук, проф. *М. И. Алкацев* (Северо-Кавказский горно-металлургический институт);

гл. спец. Управления стратегического планирования ООО «УГМК-Холдинг» д-р техн. наук, проф. *Г. В. Скопов*

Научный редактор — проф., д-р техн. наук *С. С. Набойченко*

**Агеев, Н. Г.**

A23 Моделирование процессов и объектов в металлургии : учеб. пособие / Н. Г. Агеев. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2016. — 108 с.

ISBN 978-5-7996-1712-7

В пособии изложены основы системного анализа, принципы создания математических моделей процессов и объектов в металлургии, математические методы оптимизации технологических систем. Пособие предназначено для студентов, обучающихся по профилю «Металлургия цветных металлов». Может быть полезно для специалистов предприятий цветной металлургии.

Библиогр.: 8 назв. Табл. 5. Рис. 41.

УДК 669:004.94(075.8)

ББК 34.3вбя73

---

*Учебное издание*

**Агеев** Никифор Георгиевич

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ**

Редактор И. В. Меркурьева

Верстка О. П. Игнатъевой

Подписано в печать 25.03.2016. Формат 70×100/16.  
Бумага писчая. Печать цифровая. Гарнитура Newton.  
Уч.-изд. л. 7. Усл. печ. л. 8,7. Тираж 100 экз.  
Заказ 63

Издательство Уральского университета  
Редакционно-издательский отдел ИПЦ УрФУ  
620049, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 5  
Тел.: 8(343)375-48-25, 375-46-85, 374-19-41  
E-mail: rio@urfu.ru

Отпечатано в Издательско-полиграфическом центре УрФУ  
620075, Екатеринбург, ул. Тургенева, 4  
Тел.: 8(343) 350-56-64, 350-90-13  
Факс: 8(343) 358-93-06  
E-mail: press-urfu@mail.ru

ISBN 978-5-7996-1712-7

© Уральский федеральный  
университет, 2016

---

## Введение

---

По мере развития технологии производства цветных металлов повышаются требования к качеству технологического процесса. В переработку поступает все более сложное комплексное сырье, содержащее, помимо основного извлекаемого металла, ряд других ценных компонентов. Например, медная руда помимо меди содержит цинк, свинец, железо, серу, золото, серебро и другие примеси. Комплексное использование сырья предполагает извлечение из него всех ценных компонентов, возможное на данном уровне развития технологии.

Чем жестче требования по комплексности использования сырья, тем сложнее технологическая схема, тем больше количество операций в этой схеме, тем больше количество полупродуктов и оборотов в таких схемах. Управлять такими схемами и проектировать такие технологии становится сложнее.

Особенностью современных технологических процессов является увеличение единичной мощности технологических агрегатов. Например, в металлургии меди на медеплавильных заводах, как правило, один, реже два головных агрегата, через которые проходит весь поток поступающего сырья. На Среднеуральском медеплавильном заводе головные агрегаты — две печи Ванюкова — перерабатывают более чем по 1.5 тысяч тонн шихтовых материалов в сутки каждая.

Возрастающие требования к уровню технологического процесса приводят к тому, что управлять им на основе опыта и интуиции персонала становится невозможно, а ошибки по управлению становятся слишком дорогими.

Выходом из этой ситуации становится внедрение информационных систем для управления технологическими процессами, основное назначение которых состоит в том, чтобы обеспечить обработку информации о технологическом процессе и на основе результатов обработки оказать помощь персоналу, управляющему технологическим процессом, в принятии решений, направленных на изменение параметров технологического процесса для достижения поставленной цели. Информационные

.....

системы работают наиболее эффективно, если в их составе имеется модельная система поддержки принятия решений, в основе которой лежит математическая модель технологического процесса, позволяющая на основе расчетов прогнозировать ход и результат технологического процесса при изменяющихся условиях его проведения.

Создание математической модели металлургического объекта требует участия специалиста, глубоко понимающего суть физико-химических превращений, происходящих в данном технологическом процессе. Наиболее важными из них являются химические реакции, сопровождающиеся тепловыми эффектами, переносом тепла и вещества (теплопередачей и диффузией), фазовыми превращениями. Инженер-металлург обладает достаточными знаниями в этой области.

Использование математической модели в системах управления технологическими процессами требует участия и других специалистов: по информационным технологиям, автоматизации технологических процессов, программированию, вычислительным методам математики и других. Создание и использование модели предполагает диалог между специалистами, и инженер-металлург должен владеть основными понятиями и терминологией для общения.

Создание модели технологического процесса в металлургии начинается с системного анализа, результаты которого позволяют выбрать метод построения математической модели.

Системные свойства технологических процессов и объектов многообразны, поэтому существуют различные методы создания моделей. Выбор адекватного метода построения модели зависит от свойств моделируемого объекта и цели моделирования.

Наличие модели позволяет прогнозировать поведение объекта. Применительно к металлургическим процессам это означает возможность рассчитать массы и составы полученных продуктов при известных составах сырья и параметрах процесса, таких как температура, давление, продолжительность и других.

Наиболее эффективно использование модели для оптимального управления технологическим процессом. При этом модель позволяет ответить на главный вопрос: какими должны быть по величине управляющие воздействия (соотношение между компонентами в шихте, продолжительность, температура, интенсивность перемешивания) для достижения наилучшего результата (максимального извлечения металла в целевой продукт, максимальной производительности, минимальных затрат энергии или топлива).

---

# 1. Системный анализ

---

## 1.1. Основные понятия и определения системного анализа

---

Основным понятием системного анализа является понятие о технологических процессах и объектах как системах. *Система* — составной объект, части которого закономерно объединены и совместно выполняют общую функцию.

Системы могут быть искусственными и естественными.

Естественные системы не имеют определенной цели существования и создаются в ходе эволюции. Примером естественных систем являются биологические, например организмы. Другим примером являются социальные системы. Искусственные системы отличаются тем, что они создаются для вполне определенной цели (технические и технологические системы).

Целью технологических систем в металлургии цветных металлов является переработка сырья, содержащего цветные металлы, с получением продукта, имеющего заданные свойства.

Система, как целостный объект, существует во внешней по отношению к ней среде (можно провести границу между системой и внешней средой). В металлургических технологических системах внешняя среда проявляет себя как источник перерабатываемого сырья и потребитель произведенного продукта.

Система мысленно или физически может быть разделена на элементы, таким образом, система представляет собой совокупность элементов. Элементы объединяются в систему за счет связей. В любой системе существует определенная структура связей.

Задачей системного анализа является определение свойств изучаемой системы. Изучение этих свойств позволяет в последующем выбрать для соответствующей задачи метод построения модели. Таким

образом, системный анализ является инструментом, позволяющим изучать функционирование сложных технологических систем и выбирать методы моделирования таких систем.

Система — это объект, обладающий набором системных свойств, к числу которых относятся:

- целостность и членимость;
- наличие существенных связей;
- наличие структуры или организации;
- наличие интегративного качества.

**Целостность и членимость.** Система как целостный объект может быть выделена из внешней среды, а как составной объект может быть мысленно или физически разделена на составные части. Границами технологической системы в металлургии являются точки поступления исходного сырья и выхода готовой продукции. Масштаб системы может быть различным: от предприятия до отдельно рассматриваемой химической реакции, которая протекает в том или ином технологическом процессе. Как систему можно рассматривать также и отдельный технологический аппарат, совокупность таких аппаратов или технологических операций, т. е. технологическую схему, участок, отделение или цех.

**Наличие существенных связей.** Элементы объединяются в систему за счет существующих между ними связей. Связи можно разбить на три основные группы:

- вещественные;
- энергетические;
- информационные.

Вещественные связи представляют собой потоки вещества, циркулирующие между элементами системы. Особенности потоков вещества:

- агрегатное состояние может быть различным (твердое, жидкость, газ);
- фазовое состояние (одно- или многофазное).

Вещественные связи в системе подчиняются закону сохранения вещества: сумма масс всех потоков, поступающих в элемент системы, равна сумме масс, покидающих элемент системы. Для каждого элемента системы мы можем составить материальный баланс.

Энергетические связи представляют собой потоки энергии, циркулирующие между элементами системы. Для металлургических систем виды энергии могут быть различными, наибольшее значение имеют



потоки тепловой энергии. В некоторых технологических процессах (электролизе, например) более важное значение имеют и другие виды энергии (электрическая, механическая).

Энергетические связи подчиняются закону сохранения энергии, таким образом, для каждого элемента системы можно составить энергетический баланс. Традиционным для металлургии является тепловой баланс.

Информационные связи представляют собой потоки информации, циркулирующие между элементами системы. Информация, циркулирующая в потоках, представляет собой величины технологических параметров, которые характеризуют работу каждого элемента системы. Чем выше уровень технологии, тем большее количество таких параметров измеряется по ходу технологического процесса, тем большее количество информации получается в информационном потоке. В отличие от вещественных и энергетических связей, информационные потоки описываются не законами сохранения, а законами распространения информации.

Все связи системы характеризуются *направленностью*. На рис. 1 показаны связи между элементами в системе и отмечено их направление.

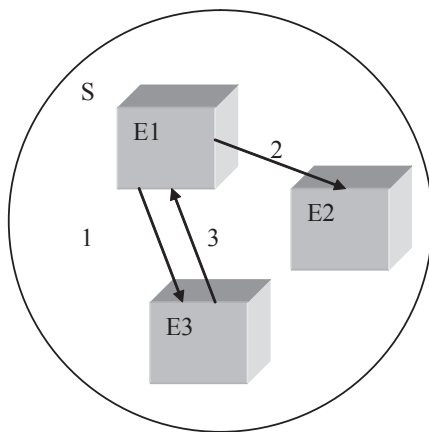


Рис. 1. Связи между элементами в системе:

E1...E3 — элементы 1...3; связь 1 — прямая связь E1 и E3; связь 3 — обратная

Связи могут быть физически наполненными и ненаполненными.

Физически ненаполненные связи — это связи типа отношений  $A > B$ ,  $A < B$ ,  $A = B$ . Физически наполненные связи — вещественные и энергетические.

Связи должны обладать устойчивостью, т. е. они должны существовать достаточно длительное время.

Вещественные связи в технологических системах реализованы как системы промышленного транспорта. Конкретный вид этих систем зависит от свойств материальных потоков: для твердых материалов — механические транспортирующие машины, конвейеры различных типов. Для жидкостей и газов используют системы трубопроводного транспорта.

Связи в системе должны быть существенными. Существенность оценивается количественно по величине *силы связи* — это отношение потока вещества (энергии), проходящего через данную связь, к общему потоку вещества (энергии) в системе

$$f_i = \frac{q_i}{\sum_{i=1}^n q_i},$$

где  $q_i$  — доля общего потока вещества (энергии), приходящаяся на  $i$ -ю связь;  $\sum_{i=1}^n q_i$  — общий поток вещества (энергии) в системе.

В том случае, если сила связи больше критерия значимости  $\alpha$ , связь считается существенной. Значение критерия значимости выбирается исходя из ошибок измерения технологических параметров в том или ином технологическом процессе ( $\alpha = 0,02 \dots 0,05$ ).

**Наличие структуры или организации.** Устойчивая во времени конфигурация связей образует структуру системы.

При описании систем на стадии системного анализа используется иерархический подход: на первом этапе описания системы стремятся представить ее как совокупность небольшого количества элементов, при этом каждый элемент является подсистемой и на следующем иерархическом уровне может быть разделен на некоторое количество своих элементов.

Иерархический подход (рис. 2) позволяет показать сложные технические системы в простом виде, упрощая понимание взаимодействия всех элементов, что дает возможность представить функционирование всей системы в целом. Чем глубже уровень описания системы, тем больше элементов мы различаем в ее составе. Например, автомобиль можно рассматривать как техническую систему. Цель такой си-

системы — перевозка пассажиров и (или) груза в заданном направлении (по дороге) за счет использования энергии топлива. На первом этапе системного анализа автомобиль предстает совокупностью небольшого числа элементов: двигатель является источником энергии, ходовая часть обеспечивает передвижение по дороге, рулевое управление и тормоза позволяют следовать по заданной траектории движения, кузов, шасси и кабина объединяют все элементы и несут груз и пассажиров.

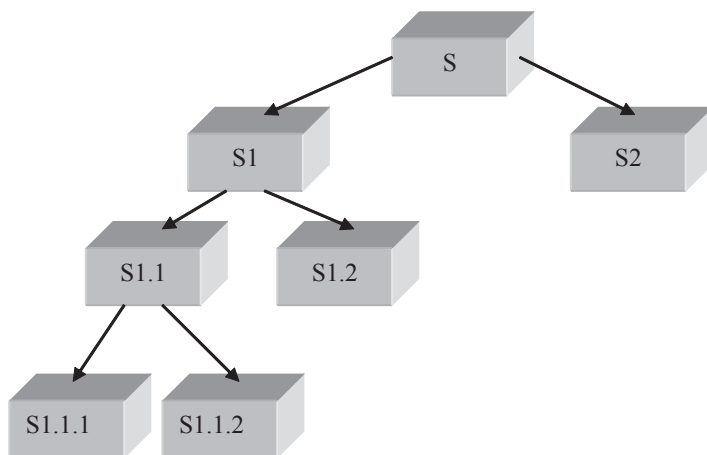


Рис. 2. Иерархия структуры системы

При более глубоком анализе на следующем иерархическом уровне каждый из перечисленных элементов автомобиля рассматривается как подсистема, состоящая из своих элементов. Двигатель, как источник энергии для движения, преобразует химическую энергию топлива в механическую энергию вращения вала. Для этого двигатель должен иметь систему питания топливом и воздухом (без воздуха топливо не горит), систему выпуска отработавших газов, механизм распределения топливовоздушной смеси по цилиндрам, кривошипно-шатунный механизм, с помощью которого движение поршней в цилиндрах преобразуется во вращение вала.

Такой анализ можно продолжать и далее, до отдельных деталей, из которых состоит каждая подсистема. Разумеется, общее количество деталей будет возрастать очень быстро и достигнет многих тысяч. Если же начать с того, что автомобиль является совокупностью нескольких тысяч деталей, то взаимодействие их понять невозможно.

Рассмотрим некоторые *типовые структуры связей* в системах.

**Сетевая структура.** Пусть имеется система из пяти элементов, показанная на рис. 3. Число элементов системы  $n = 5$ , каждый из них имеет  $(n - 1)$  связь. Каждый элемент в такой структуре связан со всеми остальными.

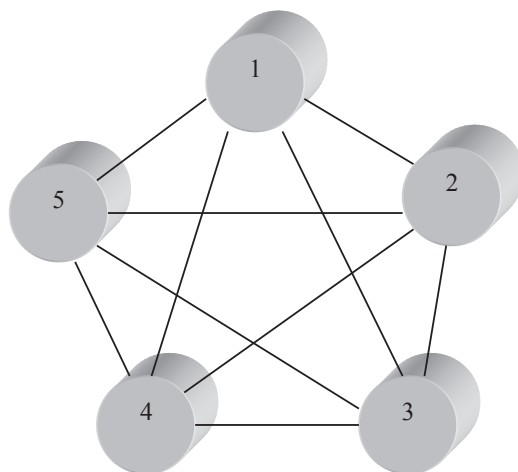


Рис. 3. Сетевая структура связей в системе

Достоинства такой структуры: устойчивость, равноправность элементов. В случае, если какой-либо элемент неработоспособен (потерял связи с остальными элементами системы), система в целом остается работоспособной. Ущерб с точки зрения функционирования системы минимальный и одинаковый для любого из элементов.

Количество связей в сетевой структуре наибольшее, а каждая связь требует определенных затрат. Следовательно, такая структура надежная, но дорогая. Ее применение оправданно там, где надежность функционирования системы является основным требованием, например в энергетике.

**Скелетная структура.** Рассмотрим систему из девяти элементов,  $n = 9$  (рис. 4).

Такая структура обладает компромиссными качествами и более дифференцированными требованиями к элементам.

Связи элементов образуют фрагменты, которые объединяются затем в целостную систему. Требования в отношении надежности функционирования элементов становятся неодинаковыми. Так, например, нарушения в работе элемента 3 (рис. 4) означают минимальный

ущерб для системы, приводящий к потере только одного этого элемента. Если же перестает работать элемент 1, то система теряет целый фрагмент, а нарушение работы элемента 4 означает, что система распадается на отдельные фрагменты и перестает функционировать. Очевидно, что самые высокие требования по надежности предъявляются к элементу 4, средние — к элементам 1 и 7, минимальные — к элементам 3, 6 и 9.

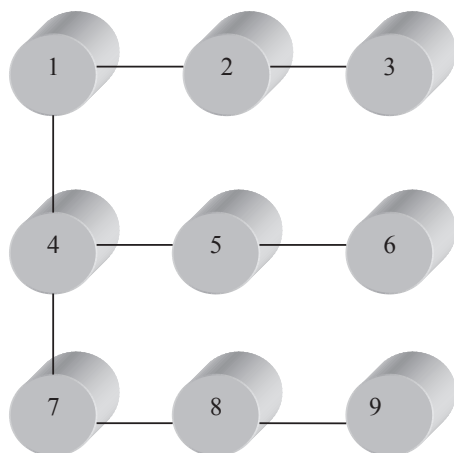


Рис. 4. Скелетная структура

**Централистская структура.** Рассмотрим еще раз систему из девяти элементов,  $n = 9$ , имеющую централистскую структуру, как показано на рис. 5.

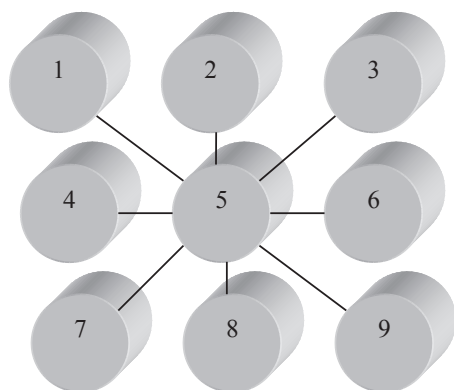


Рис. 5. Централистская структура

Основное ее отличие от предыдущих структур в том, что количество связей минимально. Это способствует снижению стоимости связей, но выдвигает жесткие требования к надежности элементов. Наиболее надежным должен быть центральный элемент системы, поскольку при невозможности его функционирования система тут же превращается в набор разрозненных элементов, т. е. перестает работать как целостный объект. К периферическим элементам требования по надежности остаются достаточно низкими: утрата любого из этих элементов приводит к минимальному ущербу для функционирования всей системы. Пример такой системы в технике — стационарные телефонные системы связи.

**Наличие интегративного качества.** Интегративное качество — это новое качество системы, которым обладает вся система в целом и не обладает ни один отдельно взятый элемент системы. Возникновение интегративного качества рассмотрим на следующем примере.

Медеплавильный завод как технологическая система имеет четко поставленную цель: он создан для переработки медных концентратов и получения черновой меди. Пользуясь методом системного подхода, мы можем выделить в структуре медеплавильного завода несколько (три, например) основных элемента (рис. 6). Такими элементами будут отделение подготовки шихты, плавильное отделение, в котором из приготовленной шихты получают медный штейн, и отделение конвертирования, в котором штейн перерабатывается на черновую медь.

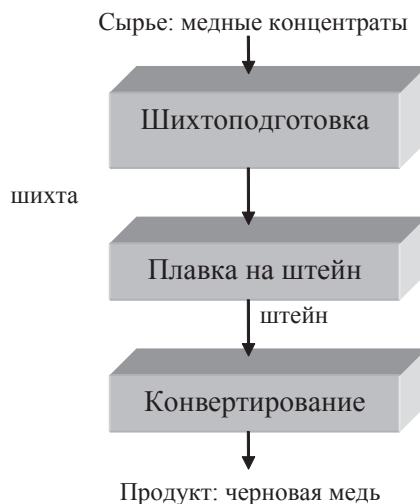


Рис. 6. Структура системы. Медеплавильный завод

Ни один из трех элементов системы не может решить поставленной задачи: отделение подготовки шихты перерабатывает медные концентраты, но производит не черновую медь, а лишь готовит шихту для последующей плавки на штейн. Отделение конвертирования производит черновую медь, но не из медных концентратов, а из ранее полученного штейна, а плавильное отделение и вовсе далеко от поставленной цели, поскольку для его работы необходима подготовленная шихта, а результатом плавки является полупродукт — медный штейн.

Интегративное качество системы образуется только в совокупности всех ее элементов. В целом медеплавильный завод решает поставленную задачу, хотя ни один из его элементов не обладает таким свойством.

## 1.2. Внешние связи системы

---

Рассмотрим технологическую систему, находящуюся в контакте с внешней средой.

Что же понимать под внешней средой? По отношению к технологической системе внешняя среда — это источник сырья и потребитель полученного продукта.

Руководствуясь данным определением, легко определить границы рассматриваемой технологической системы, т. е. выделить ее из внешней среды. Масштаб системы при этом может быть различным. Металлургическое предприятие является примером системы большого масштаба, цех предприятия, участок и отделение — системы меньшего масштаба, еще меньший масштаб представляет собой отдельно взятый технологический аппарат или операция технологической схемы. Наименьший масштаб технологических систем в металлургии цветных металлов соответствует отдельно рассматриваемой химической реакции, которая сопровождается тепло- и массообменом.

В процессе выделения системы из внешней среды мы должны выделить внешние связи системы (рис. 7). Связи эти направленные, часть из них ведет от внешней среды к системе и называется *входами* системы, другие связи называются *выходами* и ведут от системы к внешней среде. Входы и выходы системы объединяют в несколько основных групп.

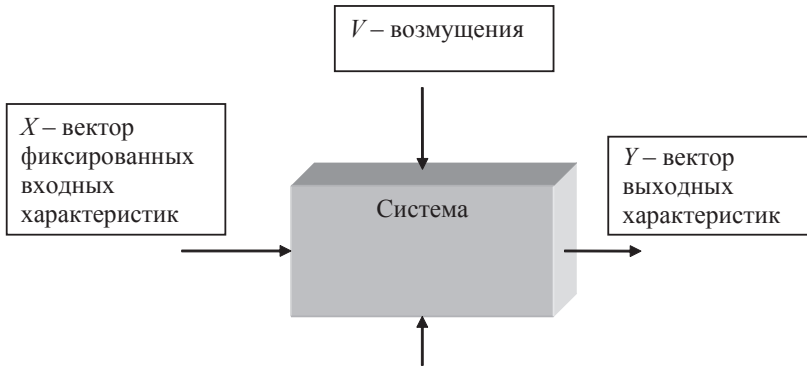


Рис. 7. Внешние связи системы

$X$  — вектор фиксированных входных характеристик,  $X = X(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$  — набор из  $n$  величин, характеризующих вход системы. Величины компонентов вектора  $x$  известны, но недоступны для изменения (например, состав сырья по определяемым компонентам, габариты печи и др.).

$U$  — вектор управляющих воздействий,  $U = U(u_1, u_2, \dots, u_m)$ . Число компонентов вектора  $U$  и  $X$  может быть в общем случае разным. Величины компонентов этого вектора также нам известны и доступны для изменения в определенных пределах:  $a_1 \leq U_1 \leq b_1$ ;  $a_2 \leq U_2 \leq b_2$ ;  $a_m \leq U_m \leq b_m$  (например, температура, давление и др.). Компоненты вектора управляющих воздействий являются своего рода «рулями», изменяя которые в разрешенных пределах мы добиваемся хода технологического процесса в нужном направлении, т.е. осуществляем управление процессом.

$V$  — вектор возмущений. Значения компонентов этого вектора неизвестны нам (отсутствуют средства измерений, методики анализа), т.е. это неконтролируемый вектор. В реальных технологических системах возмущения проявляются всегда. В некоторых частных случаях при анализе систем ими можно пренебречь.

$Y$  — вектор выходных характеристик,  $Y = Y(y_1, y_2, y_3, \dots, y_k)$ . Величины компонентов этого вектора нам известны; влиять на эти величины непосредственно мы не можем. Однако, изменяя доступные нам входы системы  $U$ , мы влияем на выход  $Y$ . Это влияние можно отобразить следующим образом:

$$Y = \Phi(X, U, V, \tau).$$



В общем случае состояние выхода зависит от всех входов системы и выбора момента времени.

Вектор  $Y$  характеризует результат работы системы, степень достижения поставленной цели. Компоненты вектора  $Y$  — это состав и масса полученных технологических продуктов.

Управление технологической системой означает выбор и поддержание таких величин управляющих воздействий  $u_1, \dots, u_m$ , которые:

- не нарушают ограничений, наложенных на вход и выходы;
- позволяют получить необходимое значение  $y_1, \dots, y_k$  на выходе.

Символ  $\Phi$  называется оператором перехода. Если он сформулирован математически, то это означает, что построена математическая модель процесса. В простейшем случае  $\Phi$  может быть задан аналитическим выражением, аргументами которого являются входные величины и время.

В большинстве случаев для  $\Phi$  нет аналитических выражений, но существует определенный алгоритм, действуя в соответствии с которым можно рассчитать значение компонентов  $y_1, \dots, y_k$  по известным нам входным характеристикам и управляющим воздействиям. Другими словами, зная  $\Phi$  (имея математическую модель технологического объекта), мы можем рассчитать (предсказать, прогнозировать) состояние выхода этого объекта в зависимости от состояния входов для любого момента времени.

Для этого необходимо «всего лишь» установить конкретную форму оператора перехода  $\Phi$ , т. е. построить математическую модель. Как же это делается?

### 1.3. Классификация систем по их свойствам

---

Выбор метода построения модели представляет собой сложную задачу, включающую элементы творческого процесса, трудно поддающуюся формализации. Вряд ли возможно придумать некий алгоритм, следуя которому мы для любой системы тут же получим ее модель. В некотором смысле моделирование сочетает научный подход с искусством. В качестве наиболее общей рекомендации следует отметить, что выбор метода построения математической модели объекта в большой степени зависит от свойств самого объекта, т. е. техно-

логической системы, поэтому предварительно надо познакомиться с классификацией систем.

Для классификации систем используется несколько признаков:

- число элементов и подсистем;
- характер связи с внешней средой;
- зависимость характеристик систем от времени;
- тип входных и выходных величин;
- уровень организации системы и задач.

**Число элементов и подсистем.** По данному признаку различают *простые* (малые) системы, содержащие меньше 1000 элементов, и большие, *сложные*, системы с числом элементов более 1000. Число элементов сильно зависит от уровня детализации при описании систем, поэтому любая система при повышении уровня этой детализации склонна оказаться в числе больших. На практике к классу больших систем могут быть отнесены предприятия и их объединения, большие цеха, в составе которых несколько переделов или отделений, сложные многостадийные технологические схемы. Отдельный технологический аппарат будет скорее простой, или малой, системой.

**Характер связи с внешней средой.** По этому признаку все множество систем делят на детерминированные и стохастические системы. В *детерминированной* системе состояние выхода жестко функционально связано с состоянием входа. Рассмотрим систему с единственным входом и единственным выходом (рис. 8).

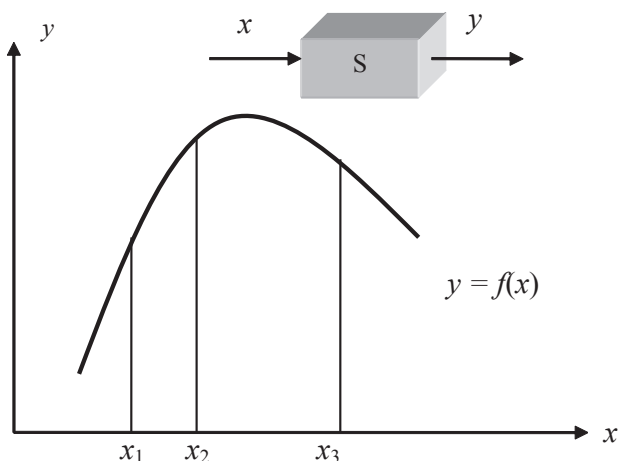


Рис. 8. Детерминированная система:

$x$  — состояние входа;  $y$  — состояние выхода

Для такой системы  $y = f(x)$ , что позволяет представить ее поведение в декартовой системе координат. Зависимость выхода  $y$  от входа  $x$  представляет собой график, который называется переходной характеристикой.

Детерминированная система отличается тем, что в ней связь выхода  $y$  и входа  $x$  имеет функциональный жесткий характер: определенному значению  $x$  на входе соответствует вполне определенное значение  $y$  на выходе.

В *стохастической* системе, показанной на рис. 9,  $\bar{y} = f(x)$  не является в математическом смысле функцией.

Наблюдается корреляция  $y$  и  $x$ , может быть составлено уравнение регрессии  $\bar{y} = f(x)$ . Каждому значению входа  $x$  в такой системе соответствует значение  $y$ , находящееся в некотором интервале значений. Этот интервал отмечен на рисунке штрихами. Связь имеет менее жесткий характер, и можно лишь утверждать, что, при заданном  $x$  на входе,  $y$  на выходе с определенной вероятностью примет значения из этого интервала. Причина данного явления в том, что на систему оказывают влияния возмущения (показанные на рисунке как вектор  $v$ ). Стохастические системы являются более общим случаем систем, лишь при определенных обстоятельствах мы можем пренебречь возмущениями и описывать системы как детерминированные.

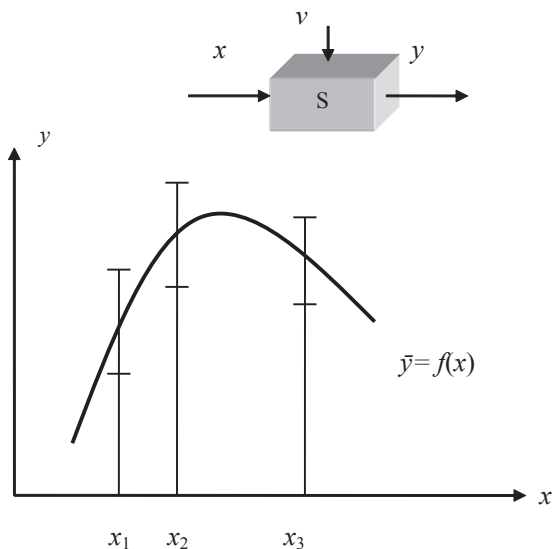


Рис. 9. Стохастическая система

**Зависимость характеристик систем от времени.** По этому признаку системы делят на *динамические* и *статические*.

Статические системы отличаются тем, что их выход зависит только от состояния входов и не зависит от времени.

Рассмотрим поведение во времени простейшей статической системы, имеющей только один вход и выход (рис. 10). Состояние входа системы  $x$  в некоторый момент времени, который мы примем за нуль, изменяется скачком, мгновенно от  $x_1$  до  $x_2$ .

Например, проводится очистка раствора от примесей. Поступающий на очистку раствор содержится в емкостях 1 и 2 (рис. 10). В первой емкости содержание примеси в растворе составляет 5 г/л, а во второй — 10 г/л. В некоторый момент времени раствор в первой емкости закончился, и установка по очистке раствора переключается на вторую емкость. Момент переключения и будет нулевым моментом времени.

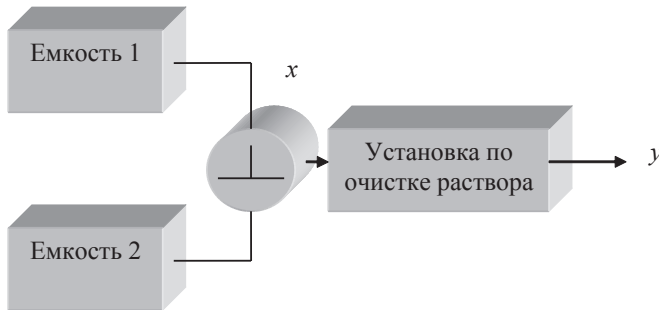


Рис. 10. Установка по очистке раствора

Пусть установка позволяет выделить 90 % примеси из раствора, следовательно, на ее выходе установится концентрация примеси, равная 0.1 от входной. До переключения емкостей выходная концентрация была равна 0.5 г/л, а после переключения она достигнет 1 г/л. Если инерция установки была бы равна нулю, выходная концентрация также мгновенно достигла бы нового значения. Такое поведение характерно для статических систем (рис. 11).

Как видно на рис. 12, в динамической системе изменения на выходе не происходят мгновенно вслед за изменениями на ее входе.

После истечения достаточно большого времени достигается новое значение выходной величины, и если на входе поддерживается постоянное значение, то состояние выхода далее также не изменяется. Такое

состояние выхода называется *новым установившимся значением*. Изменения на выходе происходят в течение некоторого времени  $T$ , которое называется *продолжительностью переходного процесса*.

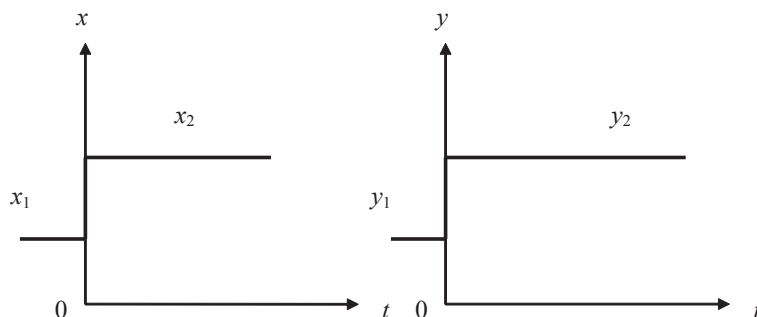


Рис. 11. Статическая система

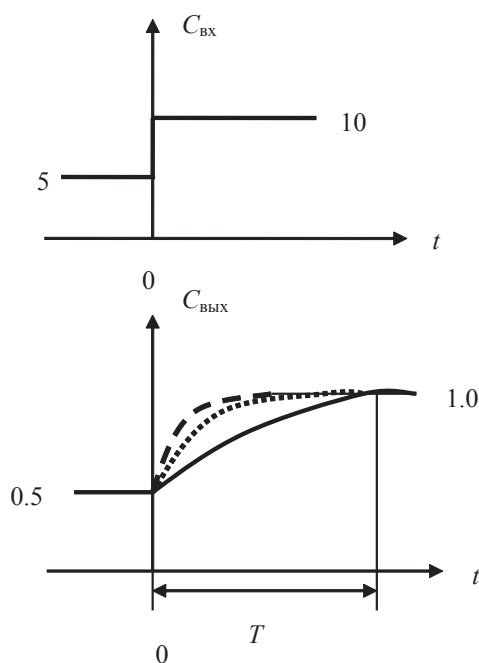


Рис. 12. Динамическая система

Во время переходного процесса состояние выхода изменяется от некоторого существовавшего ранее до нового установившегося значения, хотя состояние входа уже достигло нового значения и далее остается неизменным.

Причиной такого поведения системы является ее инерция. В нашем примере изменение выходной концентрации примеси в растворе объясняется тем, что установка для очистки раствора имеет некоторый собственный объем. В течение переходного периода мы будем наблюдать на выходе установки изменение концентрации примеси вследствие смешивания «старого» и «нового» очищенного раствора. Когда «старый» очищенный раствор будет практически вытеснен «новым», тогда изменение концентрации примеси на выходе прекратится и будет достигнуто новое установившееся значение.

Более общим свойством систем является то, что они проявляют динамические свойства. В некоторых случаях динамическими свойствами системы можно пренебречь и рассматривать ее как статическую.

Инерция технологических систем в металлургии цветных металлов довольно существенна (например, расплав в плавильной печи находится в течение многих часов), и в ряде случаев при моделировании системы ей пренебречь нельзя.

Если переходный период короткий, изменения на входе системы происходят относительно редко по сравнению с временем переходного периода, то такую систему можно рассматривать как статическую.

*По типу входных и выходных величин* системы делят на несколько классов:

- непрерывные;
- дискретные;
- дискретно-непрерывные (системы массового обслуживания).

В системах непрерывного типа входные и выходные характеристики отображаются числами непрерывного ряда. Большинство технологических систем следует рассматривать как системы непрерывные (составы, производительность, температура и другие параметры измеряются числами непрерывного ряда).

В дискретных системах состояние входных и выходных характеристик отображается дискретными величинами. Примером такой системы является показанная ниже на рис. 13 электрическая цепь, состоящая из источника тока  $GB$ , двух выключателей  $S_1$  и  $S_2$  и лампочки  $HL$ . Выключатель является узлом с двумя возможными дискретными состояниями: он либо замкнут, либо разомкнут. Такие состояния можно отобразить дискретными числами, например: 1 соответствует замкнутому, а 0 — разомкнутому состоянию выключателя. Выключатели являются также входами системы и определяют состояние лампоч-

ки, т. е. выхода системы. Лампочка также может находиться в одном из дискретных состояний: она либо горит (чему соответствует дискретное число 1), либо не горит (чему соответствует 0).

Модель такой системы представлена в табл. 1, в которой перечислены все ее возможные состояния. Кроме таблицы, для описания подобных систем применяются известные в математике выражения алгебры логики (булева алгебра).

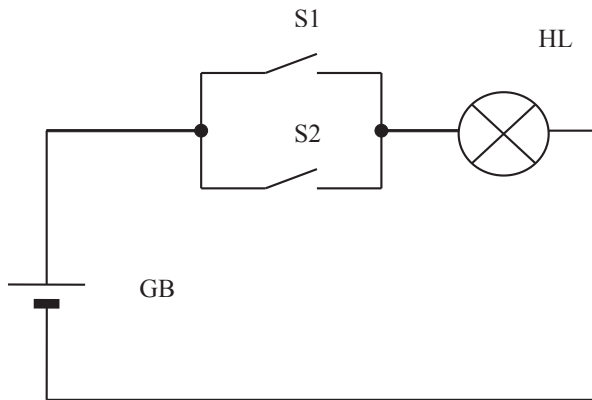


Рис. 13. Пример дискретной системы

Таблица 1

Состояния дискретной системы

Входы		Выход
$S_1$	$S_2$	HL
0	0	0
1	0	1
0	1	1
1	1	1

Таким образом, входные и выходные характеристики отображаются дискретными числами, при этом состояние выхода зависит от входа.

В дискретно-непрерывных системах часть входных или выходных величин отображается непрерывными числами, другая часть — дискретными. В таких системах непрерывной величиной является время, а дискретным числам соответствует состояние элементов системы. Данные системы также называются системами массового обслуживания. Примером их является расчетный узел магазина. Если предста-

.....

вить его работу во времени, то нетрудно увидеть, что кассир имеет дело с потоком покупателей, причем момент, когда очередной покупатель подойдет к кассе, отображается непрерывным рядом чисел, т.е. время в такой системе непрерывно. Состояние кассира можно отобразить дискретными числами: он либо занят расчетом с покупателем (1), либо свободен и находится в состоянии ожидания очередного покупателя (0). Состояние 1 длится некоторое время, зависящее от ряда случайных факторов, например количества и особенностей покупок. Это время расчета с покупателем тоже измеряется непрерывным числом.

Задача моделирования подобных систем состоит в определении их пропускной способности или производительности.

В металлургии встречаются примеры дискретно-непрерывных систем. В частности, работу конвертерного отделения для переработки штейна можно рассматривать с позиций теории систем массового обслуживания. При этом следует учесть, что конвертер является устройством с двумя возможными состояниями: он либо находится под дутьем, т.е. совершает полезную работу по переработке штейна, либо находится в состоянии вспомогательных операций (ожидание заливки штейна, заливка штейна, слив шлака), когда дутье не подается и полезная работа не совершается. Производительность конвертерного отделения зависит от того, какую часть времени составляют полезная работа и ожидание, и в данном случае цель моделирования состоит в определении вероятности пребывания конвертера в состоянии полезной работы.

Другими примерами дискретно-непрерывных систем является работа электролизных ванн в цехе электролиза, работа мостовых кранов в пролете металлургического цеха.

По уровню организации системы и задачам различают системы, показанные на рис. 14.

Функции АСНИ — исследование технологических систем на уровне отдельно взятых физико-химических явлений, технологических процессов или целых технологий. Оптимизация предполагает поиск наилучших условий работы технологической системы.

Прямое технологическое управление — функция АСУТП — означает предварительный поиск оптимальных условий и поддержание этих условий по ходу технологического процесса. Сами оптимальные условия не постоянны, они зависят, в частности, от состава перерабатываемого сырья.



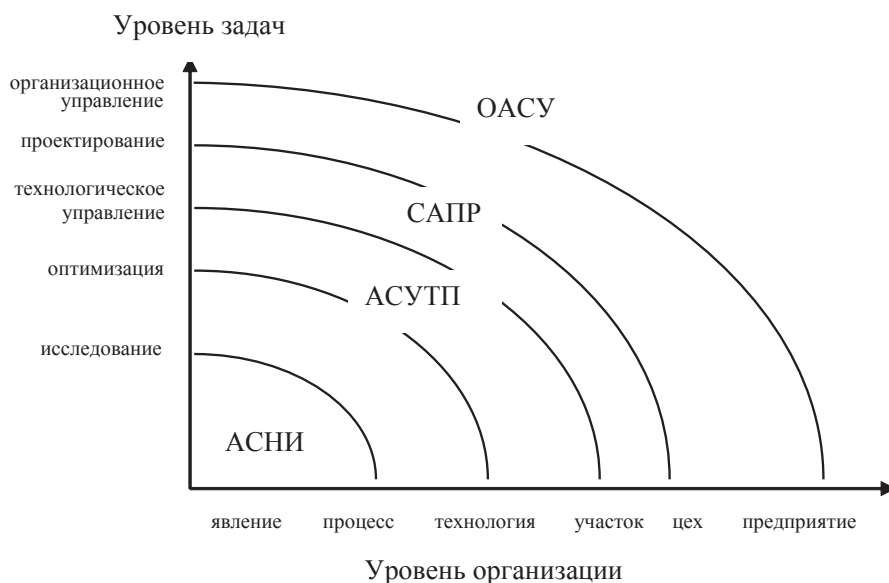


Рис. 14. Классификация систем по уровню организации и задачам:

АСНИ — автоматизированные системы научных исследований; АСУТП — автоматизированные системы управления технологическими процессами; САПР — системы автоматизированного проектирования; ОАСУ — организационные автоматизированные системы управления

САПР предназначены для создания новых технологий. В процессе их работы просчитываются многочисленные варианты технологии, отличающиеся, например, составом исходного сырья, набором технологических операций, применяемых для их осуществления аппаратов. По результатам этих многовариантных расчетов на основе заранее определенных критериев оптимальности выбирается наилучший вариант.

ОАСУ существуют на многих предприятиях и, как правило, решают задачи текущего управления в целом, проводят анализ результатов работы и планирования. В составе систем есть подсистемы учета, анализа, планирования материально-технических ресурсов, учета труда и заработной платы, бухгалтерского учета, оборота финансовых средств и т. п.

Классификация систем по их свойствам позволяет определить метод построения математической модели для конкретного технологического процесса.

---

## 2. Моделирование технологических процессов и объектов

---

### 2.1. Основные понятия и определения

---

**М**одель есть отражение наиболее существенных сторон моделируемого объекта.

*Моделируемый объект* — технологическая система.

*Субъект моделирования* — специалист предметной области (в нашем случае — инженер-металлург), создающий модель. Таким образом, всякая модель содержит субъективный фактор. Основная роль субъекта моделирования состоит в определении существенных свойств объекта, которые должны быть включены в модель. Существенные признаки объекта выбираются исходя из цели создания модели и особенности моделируемого объекта.

Модель и моделируемый объект не являются идентичными: модель является аналогом объекта моделирования.

Для объекта моделирования в металлургии наиболее значимыми являются физико-химические процессы, являющиеся основой той или иной технологии. Таким образом, модели металлургических процессов и объектов должны включать, в первую очередь, описания химических взаимодействий, сопровождающие их явления тепло- и массопереноса, гидродинамические особенности работы, фазовые превращения и т. д.

Различают два существенно отличающихся между собой класса моделей:

- модели-объекты;
- концептуальные модели.

Отличительной особенностью моделей-объектов является то, что они воспроизводят однородный физический процесс, происходящий

.....

в моделируемом объекте. Например, для изучения движения газов и запыленности газового потока, движущегося в рабочем пространстве печи, создают физическую модель, которая является уменьшенной масштабной копией печи. Через такую модель пропускают поток газа (или жидкости), воспроизводя однородный с моделируемым объектом процесс движения газа. Для того чтобы увидеть картину течения, газ в модели смешивают с дымом. Такие модели создаются на основе использования методов физического моделирования.

В отличие от моделей-объектов, концептуальные модели не являются геометрическим подобием объектов, они не воспроизводят физический процесс, а представляют собой совокупность процедур, правил, связей, закономерностей, применяя которые, мы можем достоверно описать моделируемый объект. Для записи этих процедур и правил могут использоваться различные средства.

Использование естественного языка описания позволяет создать семантическую модель (пример такой модели — технологическая инструкция). Описания с помощью естественного языка часто неоднозначны и не позволяют описать объект количественно.

Если в качестве средства описания использованы средства математики, то полученная модель называется математической. Математические средства описания объектов моделирования могут быть различными:

- аналитические средства — модель является уравнением или совокупностью уравнений различного вида;
- алгоритм;
- график;
- таблица.

Независимо от класса, к которому принадлежит модель, она должна удовлетворять двум основным требованиям к моделям.

*Экономичность* означает, что результаты, полученные с помощью модели, должны обеспечить экономию времени и материальных средств по сравнению с экспериментом на объекте. Здесь нужно иметь в виду, что некоторые исследования принципиально не могут быть проведены непосредственно на объекте моделирования.

*Традуктивность* — возможность переноса результатов моделирования с модели на моделируемый объект. Пусть, например, задача моделирования состоит в изучении особенностей течения газов в рабочем пространстве печи и нас интересует, при каких условиях (т. е.

при какой скорости течения) характер течения газа в печи станет турбулентным. Для ответа на этот вопрос проведем исследования на физической модели, являющейся геометрически уменьшенной масштабной копией печи. Пусть размеры печи соответствуют  $l_o$ , а соответствующие им размеры модели  $l_m$ . Характер течения газа зависит от значения критерия Рейнольдса

$$Re = \frac{wl}{\nu},$$

где  $w$  — скорость;  $l$  — линейный размер;  $\nu$  — вязкость.

В теории подобия, являющейся основой методов физического моделирования, утверждается, что подобие модели и моделируемого объекта достигается тогда, когда одинаковы значения основных критериев подобия в модели и моделируемом объекте

$$Re_m = Re_o.$$

Выразив величины критериев Рейнольдса в модели и моделируемом объекте, получаем выражение, которое позволит нам определить, при какой скорости газа в печи характер течения будет турбулентным, если известна (измерена нами экспериментально) такая скорость в модели и известен геометрический масштаб уменьшения модели

$$\frac{w_m l_m}{\nu_m} = \frac{w_o l_o}{\nu_o} \Rightarrow w_o = \frac{w_m l_m}{l_o}.$$

Из выражений, записанных выше, следует, что недостаточно измерить скорость турбулизации потока в модели, необходимо еще знать, как пересчитать результат измерения на модели и применить его к моделируемому объекту. В данном случае измеренное значение скорости следует умножить на геометрический масштаб модели. Это и есть правило традукции, и в случае применения его к физической модели оно устанавливается на основе теории подобия.

Для математических моделей правило традукции базируется на аналогии дифференциальных уравнений, описывающих сходные свойства объекта и модели. Правила традукции выводятся на основе применения фундаментальных физических и химических законов.

Существует два пути построения модели объекта, если речь идет о математической модели:

- эмпирический;
- структурный.

Эмпирический подход применяется широко. Для построения модели в этом случае не требуется знать внутреннюю структуру моделируемого объекта, т. е. его элементы, характер связей между ними, нет необходимости знать, как описать эти связи количественно.

Эмпирический подход носит также название *метода «черного ящика»*, поскольку наши знания о моделируемом объекте не позволяют определить его внутреннюю структуру. Применительно к металлургическому процессу или объекту это означает, например, что нам неизвестны основные физико-химические взаимодействия, мы не знаем, какие именно химические реакции происходят в объекте и в какой последовательности они осуществляются, как полно завершаются и с какой скоростью протекают. Остается представить объект как систему с ее входами и выходом в виде черного ящика, внутреннее устройство которого и функционирование нам неизвестно.

В практических целях было бы достаточно ответить на вопрос, каково будет состояние такой системы при известных величинах на ее входах. Для ответа на вопрос надо закономерным образом изменять состояния входов системы и наблюдать при этом, как изменяется состояние ее выхода в ответ на изменение состояния входов. В простейшем случае можно зафиксировать состояния всех входов, кроме одного. Изменяя значение на входе (температуру, например), получим зависимость выходной величины (например, извлечение металла в раствор при выщелачивании) от этого фактора.

Зависимость выходной величины от входной в общем случае может быть нелинейной, а ее график будет представлен некой кривой. Из математики известно, что нелинейные функции могут быть представлены с помощью их разложения в ряд. Используя этот подход, можно любую функцию представить в виде полинома  $n$ -й степени  $y = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_nx^n$ .

Основная задача в процессе построения эмпирической модели сводится к определению коэффициентов полинома  $b_0, b_1, \dots, b_n$ . Приемы построения моделей этого типа широко известны и приводятся в многочисленных литературных источниках. Более того, алгоритмы их создания реализованы в статистических пакетах прикладных программ, доступных для использования практически на любом персональном компьютере. От инженера-металлурга, желающего на основе исполь-

зования эмпирического подхода получить модель технологического процесса, требуется только корректно провести системный анализ и выделить входы и выход системы.

Эмпирические модели имеют существенный недостаток. Коэффициенты, входящие в полином, не обладают каким-либо физико-химическим смыслом. Их значение и знак в лучшем случае позволяют судить о направлении и силе влияния того или иного входа на выход, но не дают информацию о причинах влияния данного фактора на выходную величину. Это ограничивает применение эмпирических моделей. К тому же эмпирические модели обладают нулевой прогностической мощностью: они могут быть использованы только тогда, когда изменение  $x$  на входе системы находится в пределах исследованного диапазона.

При использовании *структурного подхода* необходимо знать внутреннюю структуру системы, ее элементы и связи. Модель объекта создается на основе описания всех элементов и связей. Такое описание использует фундаментальные законы: закон сохранения вещества, закон сохранения энергии, закон эквивалентов, термодинамические законы и др. Для каждого элемента системы записываются материальный и тепловой балансы, которые затем объединяются в общее описание моделируемого объекта.

Независимо от того, на основе какого подхода создана модель, необходима оценка ее качества. На данном этапе необходим эксперимент с участием объекта моделирования. Идея его состоит в том, что одинаковые значения входных величин задаются на соответствующих входах объекта и модели, как показано на рис. 15. Состояние выхода объекта  $y$  измеряется экспериментально. Используя полученную модель, проводят расчет выхода и получают предсказанное значение  $\hat{y}$ . Для каждого состояния входа можно вычислить отклонение наблюдаемой выходной величины от предсказанной ( $y_i - \hat{y}_i$ ). Если повторить эксперимент многократно, изменяя состояния входа и фиксируя состояния выхода, возвести в квадрат и просуммировать все квадраты отклонений, то получим их сумму  $\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ .

Критерием качества модели может быть (и чаще всего является) минимум суммы квадратов отклонения выходной величины, наблюдаемой на объекте, и выходной величины, предсказанной с помощью

модели. Чем меньше сумма квадратов отклонений, тем лучше модель воспроизводит моделируемый объект.

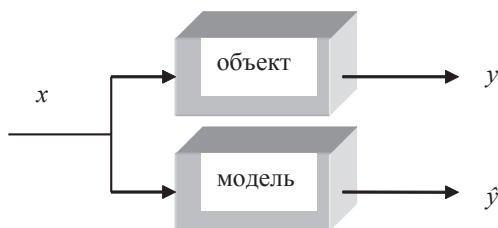


Рис. 15. Оценка качества модели

## 2.2. Алгоритм создания модели

---

Выбор метода создания модели зависит от свойств моделируемого объекта. В целом алгоритм создания модели иллюстрирует рис. 16. Рассмотрим основные этапы построения модели.

*Проблемная ситуация* возникает, как правило, когда изменяются внешние условия функционирования технологического объекта. Это означает изменение параметров либо на входе, либо на выходе (например, изменение состава перерабатываемого сырья, повышение требований к качеству готовой продукции). Изменившиеся условия требуют адекватных изменений в технологическом объекте. Необходимо ответить на вопрос о том, какие изменения в работе технологического объекта необходимы для достижения поставленной технологической цели при изменившихся условиях.

*Постановка цели* — определение цели создания модели.

Цели создания модели могут быть различными:

- исследование — уточнение закономерностей, управляющих технологическим процессом;
- прогнозирование поведения объекта — расчет выходных характеристик объекта по известным значениям входных величин;
- оптимизация — поиск оптимальных условий работы технологических объектов;
- оптимальное управление технологическим процессом (в результате поиска оптимальных условий найденные решения используются для управления технологическим процессом).

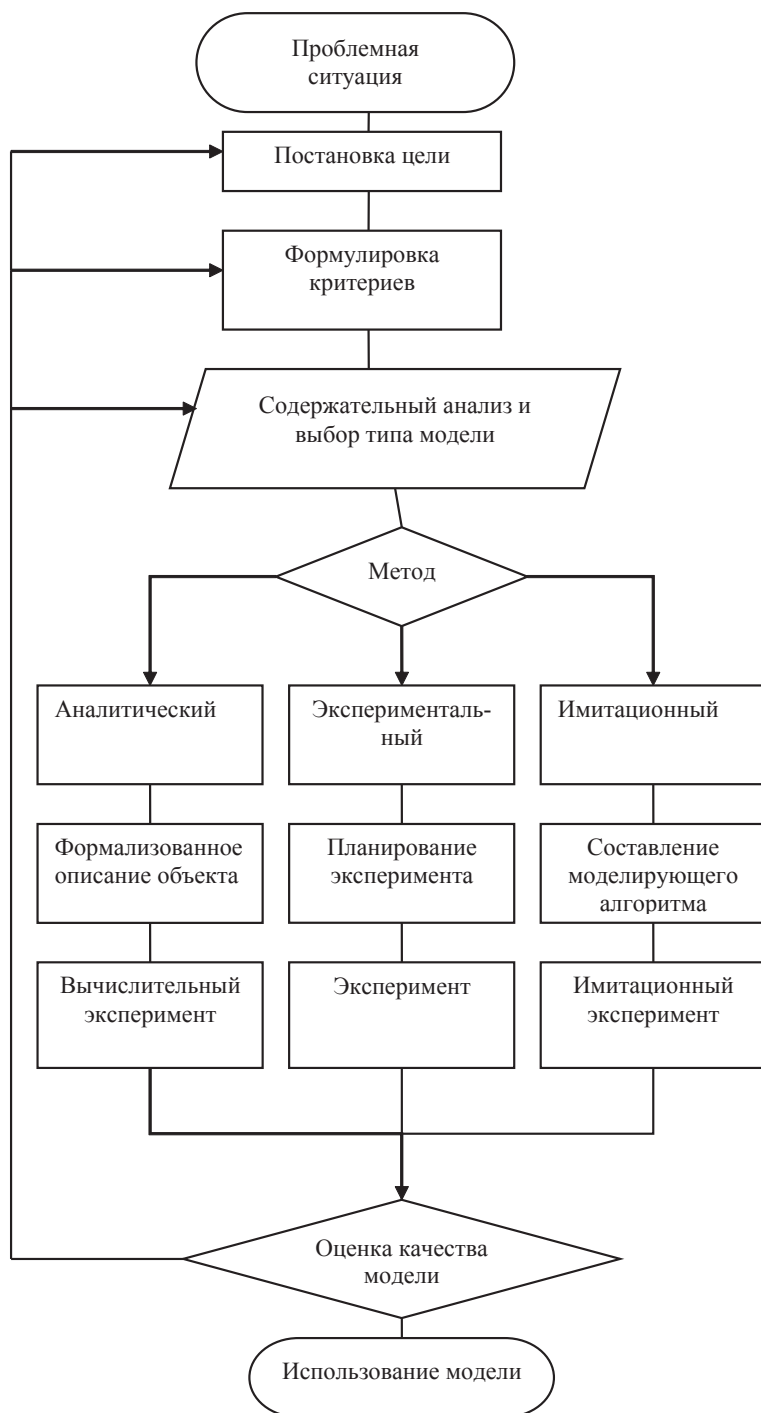


Рис. 16. Алгоритм создания модели



*Формулировка критериев* — вводят критерии для оценки качества модели. Например, сумма квадратов отклонений наблюдаемых и предсказанных величин на выходе дает основания судить о том, насколько точно модель воспроизводит работу объекта моделирования. Если модель идеально точно прогнозирует наблюдаемый результат, то сумма квадратов отклонений стремится к нулю.

*Содержательный анализ и выбор типа модели* — применяя методы системного подхода, необходимо определить границы моделируемой системы, выделить ее из внешней среды и определить ее входы и выходы. На следующем этапе системного анализа выявляется внутренняя структура объекта, определяются его элементы и связи этих элементов, образующие структуру моделируемого объекта. На данном этапе становится понятно, к какому классу в соответствии со своими свойствами принадлежит моделируемый объект.

Завершением содержательного анализа является выбор метода построения модели. Здесь возможно три дальнейших направления.

*Аналитический метод*, или *структурный подход*, используется для детерминированных систем с известной нам структурой внутренних связей.

*Экспериментальный метод*, или *эмпирический подход*, применяется для стохастических систем, подверженных действию возмущений, которыми нельзя пренебречь. Характер и величина возмущений при этом нам неизвестны, и учесть их действие аналитически невозможно. Экспериментальный подход также является единственным выбором для систем, внутренняя структура которых нам недостаточно известна.

*Имитационный метод* используется для некоторых классов систем, например для дискретно-непрерывных систем массового обслуживания.

После выбора метода построения модели содержание дальнейших шагов определяется выбранным методом.

*Составление формализованного описания* — на данном этапе, используя установленную структуру связей объекта и применяя фундаментальные законы, создают математическое описание моделируемого объекта. Модель в этом случае представляет собой алгоритм вычислений, уравнение или систему уравнений различного вида. Выполняя расчеты согласно алгоритму, решая системы уравнений по заданным начальным условиям, можно рассчитать состояние выхода

объекта. Наиболее популярными формами описания для металлургических процессов и объектов является материальный и тепловой баланс. Уравнения материального и теплового балансов могут быть записаны в дифференциальной или интегральной форме.

На этапе *планирования эксперимента* выбирается количество опытов, условия каждого опыта, т. е. сочетание факторов на входе системы в каждом проводимом опыте. Составляется план эксперимента.

*Выполнение эксперимента* — выполнение запланированных опытов. Например, для системы с тремя входами  $x_1, x_2, x_3$  и выходом  $y$  при постановке полного факторного эксперимента потребуется провести количество опытов  $2^3 = 8$ . В этих опытах сочетания значений факторов на входе не повторяются. Значения на входах будем задавать на двух уровнях, т. н. верхнем и нижнем, изменяя их в пределах выбранного диапазона. Например, температура в технологическом объекте может быть в пределах 1100...1300 °С. Для оценки влияния температуры на процесс будем проводить опыты либо при нижнем, либо при верхнем значении температуры из этого диапазона. Обозначим верхний уровень знаком плюс, а нижний уровень знаком минус. В таком случае матрица планирования эксперимента будет соответствовать нижеприведенной табл. 2.

Таблица 2

Матрица планирования эксперимента

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y$
+	+	+	$y_4$
—	+	+	$y_5$
+	—	+	$y_1$
—	—	+	$y_8$
+	+	—	$y_3$
—	+	—	$y_7$
+	—	—	$y_6$
—	—	—	$y_2$

Для ее построения выделим три столбца, соответствующих факторам на входе, и столбец для выходной величины, которую обычно именуют откликом. В столбцах факторов будем чередовать значения на верхнем и нижнем уровнях, причем в каждом правом столбце будем чередовать значения вдвое реже по сравнению с левым. В резуль-

тате получаем матрицу эксперимента с неповторяющимися значениями факторов.

Для исключения влияния возмущений и случайных ошибок (связанных, например, с погрешностями измерения отклика) опыты проводят в случайной последовательности, например, первым проводят опыт, условия которого соответствуют третьей строке матрицы, вторым по порядку проводят опыт с условиями, соответствующими восьмой строке, и т. д. Определение порядка проведения опытов называют *рандомизацией*. Каждый раз измеряют значение выходной величины (отклика) и записывают результат в соответствующую строку матрицы.

Обработка результатов полного факторного эксперимента подробно изложена в литературе и проводится в соответствии с известным алгоритмом. Полученная модель является полиномом первого порядка, содержащим свободный член и слагаемое, в котором присутствует коэффициент и значение фактора в первой степени.

Очень важно, что при таком планировании эксперимента матрица планирования обладает свойством ортогональности, а это позволяет выделить влияние каждого фактора на отклик отдельно от остальных факторов. Таким образом, величины коэффициентов в уравнении показывают направление и силу влияния каждого фактора на отклик. Если коэффициент при данном факторе имеет положительный знак и большое значение, то увеличение этого фактора способствует увеличению отклика. Как в любой эмпирической модели, значения коэффициентов  $b_0$ ,  $b_1$  показывают степень влияния данных факторов на выходную величину, но они не имеют явного физико-химического смысла, т. е. не объясняют, почему какие-то факторы оказывают большее действие на отклик по сравнению с другими.

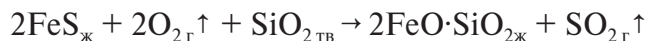
*Имитационное моделирование* применяется для создания моделей дискретных или дискретно-непрерывных систем. Такие системы плохо описываются аналитически, а их экспериментальное изучение затруднено. Модель создается как моделирующий алгоритм, воспроизводящий работу моделируемого объекта в «ускоренном времени».

### 2.3. Структурный подход для построения математических моделей

При использовании структурного подхода технологические объекты могут быть описаны на одном из следующих пяти уровней.

1. Молекулярный уровень. Металлургические процессы и объекты на этом уровне описываются как совокупность физико-химических явлений, в частности, как совокупность химических реакций.

Например, конвертирование медного штейна в первом периоде на молекулярном уровне может быть описано основной химической реакцией окисления сульфида железа, входящего в состав штейна,



Исходными веществами-участниками данной реакции являются сульфид железа, кислород подаваемого дутья и кремнезем флюса. Продуктами реакции выступают фаялит (основной компонент шлака) и диоксид серы, удаляющийся в газовую фазу.

На молекулярном уровне описание объекта сводится к описанию стехиометрических соотношений масс исходных веществ и продуктов, равновесия и кинетики основных химических реакций.

2. Уровень малого объема. Элементы малого объема — газовый пузырек, капля, твердая частица. При описании конвертирования на уровне малого объема следует учесть дополнительно, что реакция первого периода конвертирования является гетерогенной, происходит на поверхности элемента малого объема, каковым в данном случае является пузырек газа, всплывающий в расплаве. Первоначально пузырек образуется при торможении и распаде струи подаваемого в расплав дутья и содержит внутри кислород и азот. Окисление сульфида железа происходит на его поверхности и сопровождается переносом вещества из объема расплава и газового пузырька к этой поверхности. Образующийся диоксид серы отводится внутрь пузырька, а  $2\text{FeO} \cdot \text{SiO}_2$  — в объем расплава (рис. 17).

Для осуществления этой реакции отведено ограниченное время, поскольку пузырек всплывает в объеме расплава. Продолжительность всплытия пузырька определяется скоростью его движения и толщиной слоя расплава.

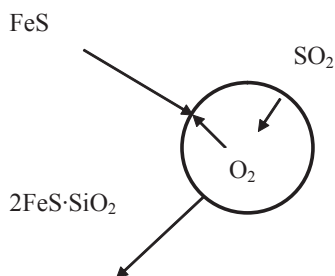


Рис. 17. Массоперенос с участием элемента малого объема

3. Уровень рабочей зоны аппарата. В дополнение к описанию предыдущего уровня необходимо отметить, что пузырек в расплаве присутствует не один. Одновременно в рабочей зоне находятся элементы малого объема в большом количестве. Рабочая зона характеризуется суммарной площадью поверхностей малых объемов. К тому же пузырьки имеют разные размеры, и необходимо учесть распределение размеров пузырьков и их средний размер, а затем рассчитать суммарную поверхность.

4. Уровень технологического аппарата в целом. На этом уровне следует учесть, что, помимо рабочей зоны, аппарат имеет также и другие части, например устройства загрузки сырья и отвода продуктов, функционирование которых оказывает существенное влияние на результаты работы всего моделируемого объекта. Скорость загрузки компонентов сырья или подачи дутья может лимитировать производительность технологического аппарата, хотя собственно физико-химические превращения осуществляются достаточно быстро.

5. Уровень технологической схемы. Моделируемый объект описывается на этом уровне как совокупность технологических операций, осуществляющихся последовательно. В технологических схемах существует большое количество оборотов, когда полученные полупродукты возвращаются на предыдущие технологические операции. На уровне технологической схемы каждая операция или технологический аппарат является объектом с сосредоточенными параметрами.

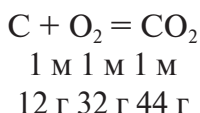
## 2.4. Использование структурного подхода для составления моделей на молекулярном уровне

Описание технологического процесса или объекта на молекулярном уровне означает описание следующих его сторон:

- стехиометрических соотношений между компонентами сырья, получаемых продуктов и вспомогательных материалов в системе химических реакций, составляющих сущность данного процесса;
- равновесия в системе обратимых химических реакций, которыми сопровождается процесс;
- скорости (кинетики) химических реакций.

## 2.5. Описание стехиометрии системы химических реакций

Реальные технологические процессы редко отображаются одной химической реакцией. Обычно процесс является совокупностью химических реакций, идущих одновременно во времени и пространстве. Часть химических реакций можно рассматривать как основные, другие — как побочные. При описании отдельной химической реакции используется закон эквивалентов. Например, горение углерода до диоксида описывается простой химической реакцией



В этой реакции соблюдается закон сохранения вещества, масса образующегося диоксида углерода равна сумме масс исходных веществ.

Сложность описания возникает в том случае, когда несколько химических реакций осуществляются в едином реакционном пространстве в одно и то же время, а как раз это и происходит в любом технологическом процессе. В таком случае возможно осуществление последовательных, параллельных, обратимых химических реакций и их сочетание. Для расчетов стехиометрических соотношений в подобных системах существует несколько методов.

## 2.6. Метод направленных графов

*Граф* — это фигура, построенная из элементов двух типов: вершин, которые изображаются в виде окружностей, и связей, представляющих собой линии, направленные от вершины к вершине.

Связи графа характеризуются направлением. Вершины графа отображают массы веществ, а связи — переход веществ из одних в другие в ходе химической реакции. Применение метода направленных графов рассмотрим на следующем примере.

Пусть технологический процесс является совокупностью следующих химических реакций:



Вещества *A* и *B* являются исходными, *C* и *D* — промежуточными, а *E*, *H* и *F* — конечными продуктами реагирования. Как видно на схеме, процесс содержит последовательные и параллельные химические реакции. В частности, *C* сначала образуется по реакции (1), а затем расходуется по реакции (3), аналогично ему *D* образуется по реакции (2) и расходуется по реакции (4). Компонент *A* параллельно расходуется по реакциям (1) и (2). Очевидно, что в этом случае ответить на вопрос о том, какая масса вещества участвует в каждой из реакций, более сложно, чем для отдельно протекающей химической реакции.

Для ответа на данный вопрос построим направленный граф, который позволяет изобразить путь всех химических реакций и массы всех участвующих в них веществ.

Пусть для упрощения дальнейших рассуждений в системе в начальный момент времени отсутствовали промежуточные вещества *C* и *D*, а также конечные продукты реагирования *E*, *F* и *H*.

Построение графа начнем с начальных веществ. Вершиной 1 обозначим исходную массу *A* в системе. Часть вещества *A* расходуется по реакциям (1) и (2), обозначим ее вершиной 2. Другая часть *A* оста-



нется в системе, и эту остаточную массу  $A$  обозначим вершиной 3. Как видно на схеме, израсходованная масса  $A$  связана с реакциями (1) и (2), обозначим соответственно вершиной 4 расход вещества  $A$  по реакции (1), а вершиной 5 — расход вещества  $A$  по реакции (2).

Такие же рассуждения применим в отношении вещества  $B$ . Исходную массу  $B$  в системе обозначим вершиной 6, расход  $B$  в реакции (1) изобразим вершиной 7, а остаток  $B$  в системе — вершиной 8.

Обратим внимание на реакцию (1). Продуктом ее является промежуточное вещество  $C$ , которого в начальный момент в системе не было. Обозначим массу  $C$ , образующуюся по реакции (1), вершиной 9. В реакции (1) принимают участие вещества  $A$  в количестве, соответствующем вершине 4, и  $B$ , в количестве, соответствующем вершине 7. Следовательно, необходимо направить связи от вершин 4 и 7 к вершине 9. Часть вещества  $C$ , являющегося промежуточным, расходуется по реакции (3). Отобразим эту массу  $C$  вершиной 11, другая часть  $C$  остается в системе, что отображает вершина 10.

Расход  $C$  обусловлен его участием в реакции (3), продуктами которой являются вещества  $E$  и  $H$ . Обозначим массу вещества  $E$ , образующуюся по реакции (3) вершиной 12, а массу вещества  $H$ , образующуюся по этой же реакции, вершиной 13. Заметим, что  $H$  образуется также и в ходе реакции (4).

Другое направление процесса связано с реализацией реакции (2), в которой принимает участие вещество  $A$  в количестве, соответствующем вершине 5. Продуктом реакции 2 является вещество  $D$ , массу которого отобразим вершиной 14. Часть промежуточного вещества  $D$  далее разрушается в ходе реакции (4), эту массу  $D$  обозначим вершиной 15, а другая часть останется в системе, что соответствует вершине 16.

Реакция (4) идет с образованием веществ  $F$  и  $H$ . Масса образующихся в ней веществ обусловлена расходом  $D$  в количестве, соответствующем вершине 15. Обозначим вершиной 18 массу вещества  $F$ , образующуюся по реакции (4), а вершиной 17 — массу вещества  $H$ , образующуюся по этой же реакции. Общую массу вещества  $H$  в системе обозначим вершиной 19. Полученный граф, приведенный на рис. 18, полностью отображает ход всех химических реакций в рассматриваемой системе.

Вершины графа, показанные на рис. 18, отображают следующие массы участвующих в реакциях веществ:

1 — начальная масса вещества  $A$  в системе;



- 2 — расход вещества  $A$  по реакциям (1) и (2);  
 3 — остаток вещества  $A$  в системе;  
 4 — масса вещества  $A$ , участвующего в реакции (1);  
 5 — масса вещества  $A$ , участвующего в реакции (2);  
 6 — начальная масса вещества  $B$  в системе;  
 7 — расход вещества  $B$  по реакции (1);  
 8 — остаток вещества  $B$  в системе;  
 9 — масса вещества  $C$ , образующегося по реакции (1);  
 10 — остаток вещества  $C$  в системе;  
 11 — расход вещества  $C$  по реакции (3);  
 12 — масса вещества  $E$ , образующегося по реакции (3);  
 13 — масса вещества  $H$ , образующегося по реакции (3);  
 14 — масса вещества  $D$ , образующегося по реакции (2);  
 15 — масса вещества  $D$ , израсходованного в реакции (4);  
 16 — остаток вещества  $D$  в системе;  
 17 — количество вещества  $F$ , полученного по реакции (4);  
 18 — количество вещества  $H$ , полученного по реакции (4);  
 19 — общая масса вещества  $H$  в системе.

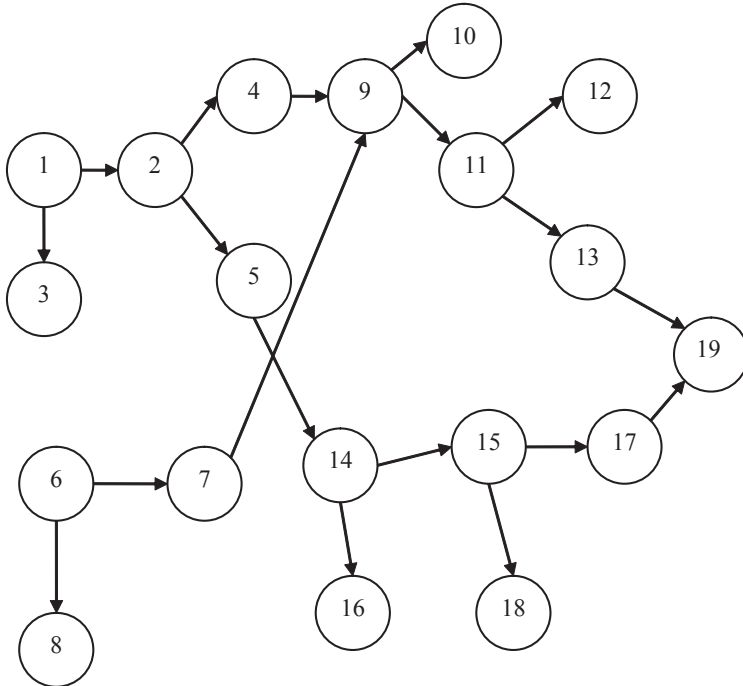


Рис. 18. Граф состояний системы

Пусть все реакции осуществляются в изолированной по веществу системе, а компоненты находятся в растворе. В начальный момент времени концентрации исходных веществ следующие:  $C_{A0} = 5$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_{B0} = 6$  моль/дм<sup>3</sup>. В системе отсутствуют промежуточные и конечные продукты:  $C_{C0} = C_{D0} = C_{E0} = C_{F0} = C_{H0} = 0$  моль/дм<sup>3</sup>.

Спустя некоторое время отобрали пробу раствора и определили текущие концентрации веществ:  $C_A = 1$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_H = 5$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_C = C_E = 2$  моль/дм<sup>3</sup>. Остальные концентрации определить не удалось. Как рассчитать  $C_B$ ,  $C_F$ ,  $C_D$ ?

Дальнейшие рассуждения проведем для объема системы, равного 1 дм<sup>3</sup>, — в этом случае значения концентраций веществ численно совпадут с их массами.

Далее начнем движение по графу от известных вершин. В частности, начальная масса  $A$  равна 5 молям, а текущая (остаточная) — 1 молю. Следовательно, расход  $A$  составил 4 моля. В отношении  $B$  мы не можем провести подобные вычисления, поскольку остаток  $B$  нам неизвестен. К тому же неясно, какая масса  $A$  расходуется по реакции (1), а какая — по реакции (2).

Воспользуемся другим направлением и будем двигаться по графу от продуктов к исходным веществам. В частности, вещество  $E$ , образующееся по реакции (3), представляет конечный продукт, и его масса соответствует вершине 12. В этой же реакции принимают участие вещества  $C$  и  $H$ , следовательно, расход  $C$  по реакции (3) в вершине 11 равен 2 молям и такая же масса  $H$  образуется в вершине 13.

Общая масса образовавшегося  $H$  равна 5 молям, из них 2 — по реакции (3), другие  $5 - 3 = 2$  моль образуются по реакции (4), что отображено вершиной 17. Отсюда следует, что в реакции (4) образуется удвоенное количество молей  $F$ , покажем его в вершине 18. Масса  $F$  в вершине 18 равна 6 молям. Расход  $D$  по реакции (4) равен числу молей  $H$ , образующихся по этой реакции, что соответствует вершине 15.

Остаток вещества  $C$  в системе равен 2 молям, что показано в вершине 10, а его расход в вершине 11 также равен 2 молям. Следовательно, по реакции (1) образуется 4 моля вещества  $C$  (вершина 9), а это требует удвоенного расхода вещества  $B$  и такого же количества  $A$  (вершины 7 и 4 соответственно). Отсюда остаток  $B$  в системе равен 2 молям.

Расход вещества  $A$  по реакции (2) составляет 2 моля, при этом образуется по реакции (4) вещество  $D$  в количестве 4 моля. Расход  $D$  равен 3 молям (вершина 15), остаток  $D$  в системе равен 1 молю.

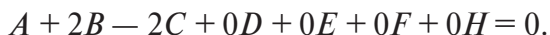
Ответ:  $C_B = 2$  моль/дм<sup>3</sup>,  $C_D = 1$  моль/дм<sup>3</sup>,  $C_F = 6$  моль/дм<sup>3</sup>.

Преимущество метода направленных графов состоит в наглядности изображения хода процесса, но решение задачи требует сложных логических рассуждений.

## 2.7. Матричный метод

Помимо метода направленных графов, существуют и другие методы решения стехиометрических задач для сложных систем химических реакций. Матричный метод позволяет свести задачу к такой форме, которая в наибольшей степени пригодна для дальнейшего ее решения с использованием компьютерной техники.

Рассмотрим решение предыдущей задачи с использованием матричного метода. В системе из четырех химических реакций принимают участие 7 веществ. Уравнения химических реакций с участием данных веществ можно записать так, как если бы в них участвовали все вещества одновременно. Если в какой-то химической реакции вещество не принимает участия, то формально это означает, что стехиометрический коэффициент при данном веществе равен нулю. Условимся также, что стехиометрические коэффициенты для исходных веществ будем принимать положительными, а для продуктов — отрицательными. В таком случае первое из химических уравнений системы химических реакций, рассмотренных в предыдущем примере, может быть записано следующим образом:



Аналогично опишем все вещества и все реакции и составим систему линейных уравнений, выражающую соотношение масс всех участвующих в реакциях веществ. Размерность системы  $4 \times 7$ , в которой 4 — число уравнений, 7 — число веществ, участвующих в химических реакциях. Матрица коэффициентов этих уравнений приведена ниже, вектор-столбец правой части нулевой.

К полученной системе уравнений необходимо добавить еще несколько уравнений, имеющих ненулевую правую часть. Данные уравнения записываются на основе начальных условий задачи. По-

лучим матрицу коэффициентов уравнений и вектор-столбец правых частей (рис. 19).

	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>H</i>	
	1	2	−2	0	0	0	0	0
	1	0	0	−2	0	0	0	0
	0	0	1	−1	0	−1	0	0
	0	0	0	1	0	−2	−1	0

Рис. 19. Матрица коэффициентов уравнений

При определенных условиях, когда известны значения исходных и текущих масс некоторых компонентов системы, можно получить единственное решение методами линейной алгебры.

Описание систем путем расчета стехиометрии химических реакций с практической точки зрения позволяет рассчитать массы всех участвующих веществ. Таким образом, можно прогнозировать поведение системы, состав продуктов, количество израсходованных веществ.

Стехиометрические расчеты предполагают, что все химические реакции в данном технологическом процессе идут до конца вправо.

## 2.8. Моделирование равновесия в системах химических реакций

Значительная часть химических реакций, составляющих основное содержание технологических процессов в цветной металлургии, являются обратимыми. Рассмотрим пример обратимой химической реакции



Равновесие в такой химической реакции достигается при определенных значениях активностей участвующих веществ. Если эти вещества находятся в растворе, а их концентрации невелики (разбавленные растворы), то с некоторым приближением вместо величин активно-

стей можно использовать величины концентраций. Равновесие в химической реакции характеризуется величиной константы равновесия

$$k = \frac{a_C^2}{a_A a_B^2} \approx \frac{C_C^2}{C_A C_B^2}.$$

Величина константы равновесия связана с изменением энергии Гиббса и может быть рассчитана по термодинамическим данным участвующих веществ

$$\ln k = -\frac{\Delta G_T}{RT},$$

где  $\Delta G_T$  — изменение энергии Гиббса для данной химической реакции;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $T$  — температура.

Рассчитав величину константы равновесия для химической реакции, идущей при заданной температуре, можно определить соотношение концентраций исходных веществ и продуктов, которое установится при достижении равновесия.

Сложнее определить равновесный состав системы, в которой одновременно происходит несколько обратимых химических реакций. Рассмотрим следующий пример.

Пусть имеется система обратимых химических реакций с участием веществ  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$ . В данной системе вещество  $A$  последовательно и обратимо превращается в вещество  $C$ , предварительно образуя  $B$ . Возможен и параллельный путь: вещество  $A$  параллельно с образованием  $B$  разлагается с образованием  $D$ . При заданных условиях (температура, давление) в системе установится равновесие и будут достигнуты равновесные концентрации веществ.

Для расчета равновесных концентраций запишем выражения для констант равновесия всех реакций через равновесные концентрации:

$$\left\{ \begin{array}{l} A \rightleftharpoons B \quad k_1 = \frac{C_B}{C_A}; \quad C_B = k_1 C_A; \\ B \rightleftharpoons C \quad k_2 = \frac{C_C}{C_B}; \quad C_C = k_2 C_B = k_1 k_2 C_A; \\ A \rightleftharpoons D \quad k_3 = \frac{C_D}{C_A}; \quad C_D = k_3 C_A. \end{array} \right.$$

Пусть в начальный момент отсутствуют промежуточные вещества  $B$  и  $C$ , а также конечный продукт  $D$

$$\begin{bmatrix} \tau = 0 \\ C_A = C_{A0} \end{bmatrix}; C_{B0} = 0; C_{C0} = 0; C_{D0} = 0.$$

Значения констант равновесия рассчитаем для каждой из реакций по термодинамическим данным:  $\Delta G_i = -RT \cdot \ln k_i$ . Таким образом, величины констант равновесия будем считать известными.

На единицу объема данной системы ( $C_{A0} - C_A$ ) представляет собой количество израсходованных молей компонента  $A$ . В соответствии со стехиометрией химических реакций и законом сохранения вещества, убыль массы  $A$  равна сумме масс образующихся веществ  $B$ ,  $C$  и  $D$ , что можно выразить уравнением

$$C_{A0} - C_A = C_B + C_C + C_D.$$

Преобразуем уравнение к следующему виду

$$C_{A0} = C_A + C_B + C_C + C_D$$

и подставим в правую часть выражения для соответствующих концентраций веществ

$$C_{A0} = C_A + k_1 C_A + k_1 k_2 C_A + k_3 C_A.$$

Сгруппируем однородные члены уравнения

$$C_{A0} = C_A (1 + k_1 + k_1 k_2 + k_3)$$

и получим выражение для равновесной концентрации  $C_A$

$$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k_1 + k_1 k_2 + k_3}.$$

Равновесные концентрации других веществ легко определить, поскольку значения всех констант равновесия нам известны из предыдущего расчета, а выражения содержат  $C_A$ .

При расчетах равновесий в системах химических реакций необходимо знать  $k_p$  каждой реакции, начальный состав системы — это дает возможность рассчитать равновесный состав системы.

Реальные задачи расчета равновесного состава систем намного сложнее: уравнения в этих задачах нелинейны; требуется учесть, что компоненты, входящие в реакцию, находятся в разных фазах; вместо концентраций корректно использовать значения активностей компонентов. Практический смысл расчета равновесий в таких сложных системах сводится к тому, что расчетный равновесный состав системы является тем физико-химическим пределом, до которого может дойти реальный процесс, если для его осуществления отведено неограниченное время.

## 2.9. Моделирование кинетики химических реакций

В физической химии скорость химической реакции определяется в соответствии с уравнением

$$r = \frac{dq}{V \cdot dt},$$

где  $dq$  — изменение массы реагирующего вещества, моль;  $V$  — мера реакционного пространства;  $dt$  — приращение времени, с.

Различают гомогенные химические реакции, в которых все участвующие вещества находятся в пределах одной фазы (газовой или жидкой). Для таких реакций мерой реакционного пространства является объем, а размерность скорости будет  $[r] = [\text{моль}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})]$ .

Гетерогенные химические реакции происходят между веществами, находящимися в разных фазах (газ—твердое, газ—жидкость, жидкость—жидкость, твердое—жидкость). Собственно химическая реакция при этом реализуется на поверхности раздела фаз, которая и является мерой реакционного пространства.

Для гетерогенных реакций размерность скорости иная:  $[r] = [\text{моль}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})]$ .

Изменение массы реагирующих веществ имеет свой знак. Для исходных веществ масса по ходу реакции убывает, изменение массы име-

ет отрицательный знак, и величина скорости принимает отрицательное значение. Для продуктов химической реакции масса возрастает, изменение массы положительно, знак скорости также положительный.

Рассмотрим простую химическую реакцию



К *простым реакциям* относятся те, которые осуществляются в одну стадию и идут до конца, т. е. являются необратимыми.

Определим скорость такой химической реакции. Для этого прежде всего необходимо решить, по какому из веществ будет определена скорость реакции: ведь  $A$  и  $B$  — исходные вещества, и изменение их масс отрицательно, а  $C$  является конечным продуктом, и его количество возрастает со временем. Кроме того, не все стехиометрические коэффициенты в реакции равны единице, а это значит, что если расход  $A$  за какое-то время равен 1 молю, то расход  $B$  за это же время будет 2 моля, и значения скорости, рассчитанные по изменению масс  $A$  и  $B$ , будут отличаться вдвое.

Для простой химической реакции можно предложить единую меру скорости, которая определяется следующим образом:

$$r = \frac{r_i}{S_i},$$

где  $r_i$  — скорость по  $i$ -му участнику реакции;  $S_i$  — стехиометрический коэффициент  $i$ -го участника реакции.

Стехиометрические коэффициенты для исходных веществ принимаются положительными, для продуктов реакции они отрицательны.

Если реакции идут в изолированной системе, не обменивающейся веществом с внешней средой, то лишь химическая реакция приводит к изменению масс вещества в системе и, следовательно, их концентраций. В такой системе единственной причиной изменения концентраций  $C$  является химическая реакция. Для этого частного случая

$$r = \frac{dC}{dt}.$$



Скорость химической реакции зависит от концентраций участвующих веществ и температуры

$$r = k C_A^{n_1} C_B^{n_2} \dots,$$

где  $k$  — константа скорости химической реакции;  $C_A$ ,  $C_B$  — концентрации веществ;  $n_1$ ,  $n_2$  — порядки по соответствующим веществам.

Это выражение известно в физической химии как *закон действующих масс*: чем выше значения концентраций, тем больше скорость химической реакции.

Порядок ( $n$ ) определяется экспериментально и связан с механизмом химической реакции. Порядок может быть целым или дробным числом, существуют также реакции нулевого порядка по каким-то веществам. Если порядок по  $i$ -му веществу равен нулю, то скорость химической реакции не зависит от его концентрации.

Значение скорости химической реакции зависит от температуры. В соответствии с законом Аррениуса константа скорости изменяется при изменении температуры

$$k = A e^{\frac{-E}{RT}},$$

где  $A$  — предэкспоненциальный множитель;  $E$  — энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $T$  — температура.

Как и величина порядка реакции, величины энергии активации и предэкспоненциального множителя определяются для конкретной реакции экспериментально.

Если химическая реакция осуществляется в гетерогенном процессе, то на ее скорость оказывает влияние также процесс подвода исходных веществ и отвода продуктов из зоны химической реакции. Таким образом, имеет место сложный процесс, в котором имеются диффузионные стадии (подвод, отвод) и кинетическая стадия — собственно химическая реакция. Наблюдаемая в эксперименте скорость всего процесса в целом определяется скоростью самой медленной стадии.

Таким образом, влияя на скорость диффузионной стадии процесса (перемешивание), влияем на скорость всего процесса в целом. Это влияние сказывается на величине предэкспоненциального множителя  $A$ .

Большинство химических реакций не являются простыми (т.е. идут не в одну стадию и не до конца) — это сложные химические реакции:

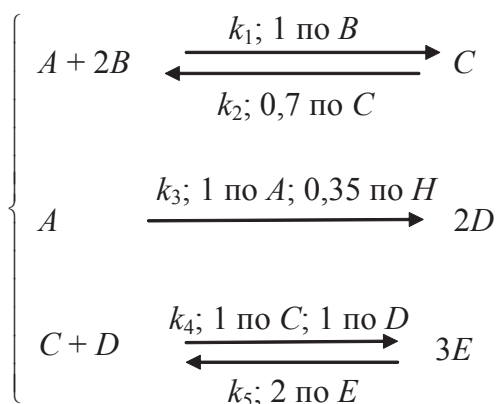
- $A \rightleftharpoons B$  — обратимые;
- $A \rightarrow B; B \rightarrow C$  — последовательные;
- $A \rightarrow B; A \rightarrow C$  — параллельные.

Для сложной химической реакции нет единой меры скорости. В отличие от простой, здесь можно говорить о скорости образования и разрушения каждого химического вещества. Таким образом, если в системе происходят химические реакции и участвуют  $n$  веществ, для каждого из  $n$  веществ есть свое значение скорости.

Для любого из веществ скорость образования и разрушения является алгебраической суммой скоростей всех стадий с участием этого вещества.

## 2.10. Скорость сложной химической реакции

Моделирование кинетики системы сложных химических реакций рассмотрим на следующем примере. Пусть имеется технологический процесс, суть которого отображается следующими химическими реакциями:



Запишем выражения для скоростей химической реакции по каждому из участвующих веществ.

$$\begin{aligned}
r_A &= -k_1 C_B + k_2 C_C^{0.7} - k_3 C_A C_H^{0.35}; \\
r_B &= -2k_1 C_B + 2k_2 C_C^{0.7}; \\
r_C &= k_1 C_B - k_2 C_C^{0.7} - k_4 C_C C_D + k_5 C_E^2; \\
r_D &= k_3 C_A C_H^{0.35} - k_4 C_C C_D + k_5 C_E^2; \\
r_E &= 3k_4 C_C C_D - 3k_5 C_E^2; \\
r_H &= 0.
\end{aligned}$$

Кинетические константы (порядки по веществам и значения констант скорости для стадий) определены экспериментально. На схеме процесса над стрелками, соответствующими стадиям, показаны величины порядков по веществам. Неуказанные порядки нулевые.

В процессе принимают участие 6 веществ: *A* и *B* являются исходными, *C* и *D* — промежуточными, *E* — конечный продукт, *H* — катализатор одной из стадий. Три химические реакции имеют пять стадий, три из которых являются прямыми, две — обратными.

Все реакции осуществляются гомогенно и проходят в замкнутой по веществу системе, что дает основания использовать для характеристики скорости выражение

$$r_i = \frac{dq}{V \cdot dt} = \frac{dC_i}{dt}.$$

На основании изложенного выше запишем выражения для скоростей по каждому веществу-участнику. Всего получим 6 выражений по числу веществ. Для каждого из участников скорость расходования или образования есть алгебраическая сумма скоростей всех стадий с участием данного вещества. Так, вещество *A* участвует в трех стадиях: в первой — в качестве исходного, во второй — как продукт, в третьей — вновь как исходное вещество. Слагаемые скорости для первой и третьей стадий будут отрицательны, для второй стадии скорость имеет положительный знак. Значения скорости для каждой стадии по закону действующих масс являются произведением константы скорости соответствующей стадии и концентраций веществ в степенях, равных порядкам по веществам. С учетом этого выражения для скоростей по веществам будут следующими:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_B + k_2 C_C^{0.7} - k_3 C_A C_H^{0.35}; \\ \frac{dC_B}{dt} = -2k_1 C_B + 2k_2 C_C^{0.7}; \\ \frac{dC_C}{dt} = k_1 C_B - k_2 C_C^{0.7} - k_4 C_C C_D + k_5 C_E^2; \\ \frac{dC_D}{dt} = k_3 C_A C_H^{0.35} - k_4 C_C C_D + k_5 C_E^2; \\ \frac{dC_E}{dt} = 3k_4 C_C C_D - 3k_5 C_E^2; \\ \frac{dC_H}{dt} = 0. \end{array} \right.$$

Последняя скорость по веществу  $H$  — катализатору третьей стадии — равна нулю. Масса катализатора не изменяется по ходу реакции.

В левой части всех уравнений присутствует производная концентрации вещества по времени, следовательно, уравнения кинетики являются дифференциальными. Концентрации в правой части уравнений в произвольный момент времени должны одновременно удовлетворять всем уравнениям, а это означает, что совокупность уравнений кинетики в математическом смысле есть система уравнений.

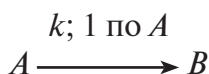
Модель химической кинетики является системой дифференциальных уравнений, решением которой является набор функций  $C_i = f_i(t)$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_A = f_1(t); \\ C_B = f_2(t); \\ C_C = f_3(t); \\ C_D = f_4(t); \\ C_E = f_5(t); \\ C_H = f_6(t). \end{array} \right.$$

Для того чтобы установить конкретный вид функций, необходимо решить систему дифференциальных уравнений, т. е. проинтегрировать систему уравнений кинетики. Интегрирование уравнений кинетики рассмотрим ниже на более простом примере, а после этого вновь вернемся к задаче, рассмотренной выше.

## 2.11. Интегрирование уравнений кинетики

Пусть идет химическая реакция разложения вещества  $A$ , в результате которой образуется вещество  $B$ . Экспериментально установлено, что она имеет первый порядок по концентрации  $A$ , а значение константы скорости для условий ее осуществления равно  $k$ . Это отображено на схеме реакции ниже:



Скорость реакции  $r_a = -kC_A$ ,

или 
$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A.$$

Определим начальные условия для решения дифференциального уравнения кинетики. Будем считать, что в начальный момент реакции нам известна концентрация вещества  $A$ , обозначим ее как  $C_{A0}$ . Запишем начальные условия в виде  $[t = 0; C_A = C_{A0}]$ . Проинтегрируем полученное уравнение, используя интегралы с подстановкой пределов, которые определяются из начальных условий: когда время равно нулю, концентрация  $A$  равна начальной, тогда в произвольный момент  $t$  концентрация равна  $C_A$

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = -k \int_0^t dt.$$

В результате интегрирования имеем

$$\ln C_A - \ln C_{A0} = -kt,$$

заменяя разность логарифмов логарифмом частного, имеем далее

$$\ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -kt.$$

Проводя потенцирование, получим

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-kt}.$$

После всех преобразований решение дифференциального уравнения представляет собой экспоненциальную убывающую функцию

$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-kt}.$$

Проверим, не противоречит ли полученное решение условиям нашей задачи. При  $t = 0$ , т.е. в момент начала химической реакции,  $C_A = C_{A0}$ , поскольку экспонента обращается в единицу. Действительно, в начальный момент концентрация вещества  $A$  равна начальной. При  $t \rightarrow \infty$  значение экспоненты с отрицательным показателем стремится к нулю. За бесконечно большое время вследствие химической реакции все вещество  $A$  разлагается и образует  $B$ .

## 2.12. Численные методы интегрирования

---

Вернемся теперь к предыдущей задаче. Очевидно, что интегрирование системы дифференциальных уравнений является более сложной задачей по сравнению с рассмотренной выше. Применение аналитических приемов интегрирования вряд ли возможно, поскольку правые части дифференциальных уравнений содержат концентрации сразу нескольких веществ, и разделить переменные не удастся.

Воспользуемся численным методом интегрирования. Для этого разобьем ось времени на малые отрезки (шаги). Считая, что производные концентраций веществ по времени есть математический предел отношения приращений концентраций к приращению времени при  $\Delta t$ , стремящемся к нулю,

$$\frac{dC_i}{dt} \approx \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta C_i}{\Delta t},$$

преобразуем систему дифференциальных уравнений в систему алгебраических.

В левой части приращение времени нам известно, существенно только то, что этот шаг должен быть малым. В правой части значения всех констант скорости нам также известны из эксперимента, это же

следует сказать и о величинах порядков. Подставим в правую часть значения концентраций всех веществ, воспользовавшись начальными условиями,

$$[t = 0, C_A = C_{A0}, C_B = C_{B0}, C_C = C_{C0} = 0, C_D = C_{D0} = 0, C_E = C_{E0} = 0, C_H = C_{H0}].$$

Каждое из уравнений системы содержит в этом случае лишь одну неизвестную величину — изменение концентрации  $\Delta C_i$ , являющееся изменением концентрации за первый шаг решения, когда время изменяется от нуля (начала химической реакции) до  $\Delta t$ .

Изменение концентрации со своим знаком суммируем с начальной концентрацией и определяем концентрацию каждого из веществ на момент окончания первого шага решения. Далее в правую часть подставим значения концентраций из предыдущего шага решения и вновь получим  $\Delta C_i$ , но теперь для следующего шага решения, как показано на рис. 20.

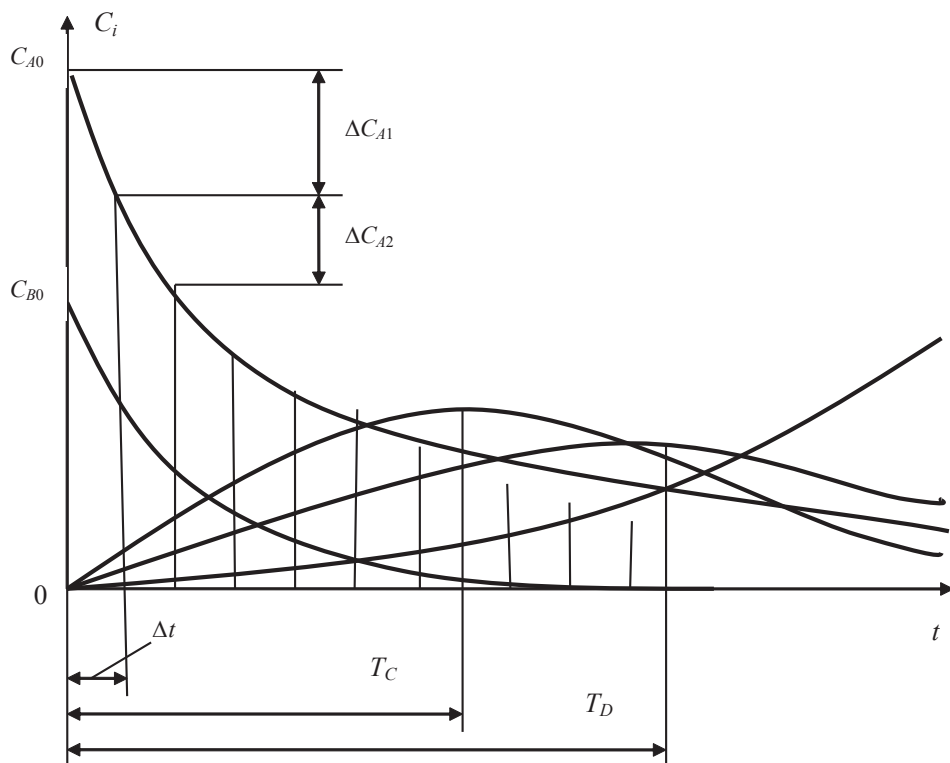


Рис. 20. Численное интегрирование дифференциальных уравнений кинетики химических реакций:

$T_C, T_D$  — оптимальное время для получения веществ  $C$  и  $D$  соответственно

На каждом шаге решения получаем ординаты, соответствующие изменению концентрации всех веществ, участвующих в реакциях. Геометрическое место точек, являющихся ординатами, даст для каждого из веществ график функции изменения концентрации во времени. Заметим, что в результате численного интегрирования мы не получаем аналитического выражения, задающего изменение концентрации во времени; ординаты на графике получаются расчетным путем. Однако построение графиков функций изменения концентраций по времени возможно, а вид кривых позволяет сделать ряд выводов, имеющих практический смысл.

Очевидно, что концентрации исходных веществ со временем убывают, поскольку они расходуются в реакции. Не менее очевидно, что концентрации конечных продуктов возрастают.

Поведение промежуточных веществ заслуживает отдельного рассмотрения. Графики концентраций промежуточных веществ имеют максимумы, соответствующие определенной продолжительности реакции. Если промежуточное вещество является целевым продуктом химических реакций, то максимум концентрации соответствует оптимальной продолжительности для получения данного целевого вещества. Так происходит потому, что в начальный момент химической реакции концентрации исходных веществ велики, а скорость химической реакции с участием исходных веществ пропорциональна их концентрациям. Реакции с участием исходных веществ сначала происходят с большими скоростями. Это означает, что промежуточные вещества образуются также с высокой скоростью.

Отметим, что скорость разложения промежуточных веществ также пропорциональна их концентрации и мала сначала. Скорость образования промежуточных веществ больше скорости их разложения, что способствует накоплению промежуточных веществ — их концентрация возрастает.

По мере развития химической реакции уменьшается скорость образования промежуточных веществ и растет скорость их разрушения. Когда величины скоростей становятся одинаковыми, тогда рост концентрации прекращается, в системе наблюдается максимум концентрации промежуточного вещества.

Далее скорость образования промежуточного вещества снижается, поскольку продолжается уменьшение концентраций исходных веществ. Скорость разрушения промежуточного вещества также



уменьшается, оставаясь больше скорости образования, а это приводит к расходованию промежуточного вещества в системе и к падению его концентрации.

Рассмотрим поведение вещества  $C$ : в начальный момент времени  $C_C = 0$ , следовательно,  $k_1 C_B > k_2 C_C^{0.7}$ . Скорость образования  $C$  превышает скорость его расходования, происходит накопление и рост концентрации  $C$  в системе. В области больших значений времени  $C_B$  мала, а  $C_C$  велика, скорость разрушения  $C$  больше скорости его образования, и концентрация компонента  $C$  в системе убывает. В некоторый момент времени обе скорости равны, чему соответствует максимум на кривой концентрации  $C$  в зависимости от времени.

Таким образом, моделирование кинетики позволяет определить образование и расходование всех веществ в системах химических реакций, установить вид функции концентрации в зависимости от времени, в ряде случаев определить оптимальные условия по ведению химической реакции.

## 2.13. Химические реакции в потоке вещества

Многие технологические аппараты работают в непрерывном режиме. Рассмотрим в качестве примера плавильную печь для переработки шихты из медных концентратов и флюсов. Схема такого аппарата приведена на рис. 21.

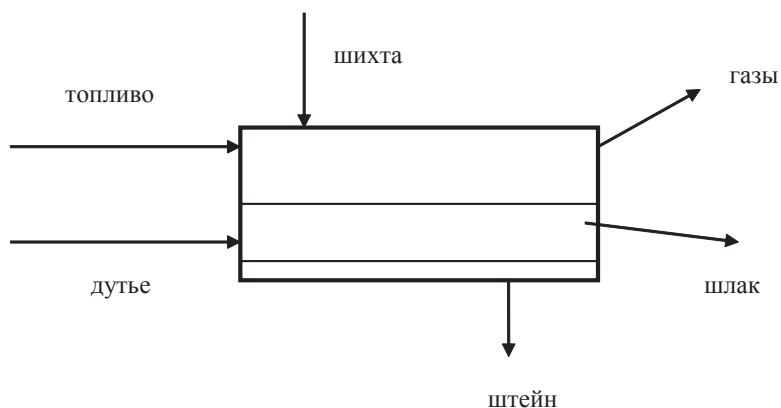


Рис. 21. Плавильная печь для переработки медных концентратов

Непрерывный проточный аппарат представляет собой реактор, в котором осуществляется определенный набор химических реакций. Наличие потоков вещества влияет на условия осуществления химических реакций. Реальные потоки вещества обладают достаточно сложными свойствами, среди которых важнейшее значение имеют гидродинамический режим (ламинарный, турбулентный, переходный) и число фаз (однофазные и многофазные потоки).

Рассмотрим поток, движущийся по трубе (рис. 22). Скорость его движения в пределах одного сечения неодинакова: наибольшее значение скорости наблюдается на оси потока, а вблизи стен за счет торможения силами вязкости эта скорость стремится к нулю. Если объемный расход среды в потоке равен  $Q$ , а площадь сечения  $F$ , нетрудно определить среднюю скорость течения потока  $W$ , равную  $Q/F$ .

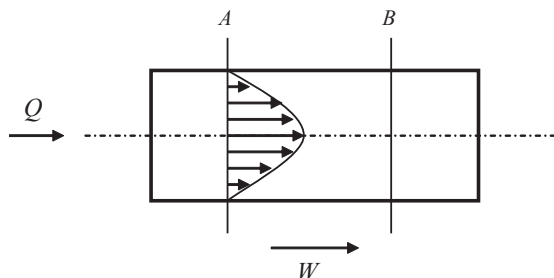


Рис. 22. Движение потока в трубе

В зависимости от скорости движения потока режим его течения может быть ламинарным, переходным или турбулентным, что зависит от соотношения сил инерции и сил вязкостного трения.

Еще больше сложностей возникает при описании многофазных потоков, а реальные потоки как раз чаще всего ими и являются. В этой связи учитывать свойства реальных потоков при создании математической модели достаточно сложно, и для создания модели аппаратов проточного типа существует несколько идеализированных моделей течения потоков.

*Модель идеального вытеснения* основана на следующих допущениях (аппаратом такого типа может быть трубчатая обжиговая печь):

- поток стационарный, объемный расход среды не меняется во времени;
- скорости во всех точках потока одинаковы;

- элемент объема  $dV$ , заключенный между сечениями потока 1 и 2 (рис. 23), является замкнутой по веществу системой (не обменивается веществом с соседними элементами),  $dV = F \cdot dl$  (рис. 23);
- в потоке идеального вытеснения отсутствует продольное перемешивание;
- поперечное перемешивание в потоке отсутствует.

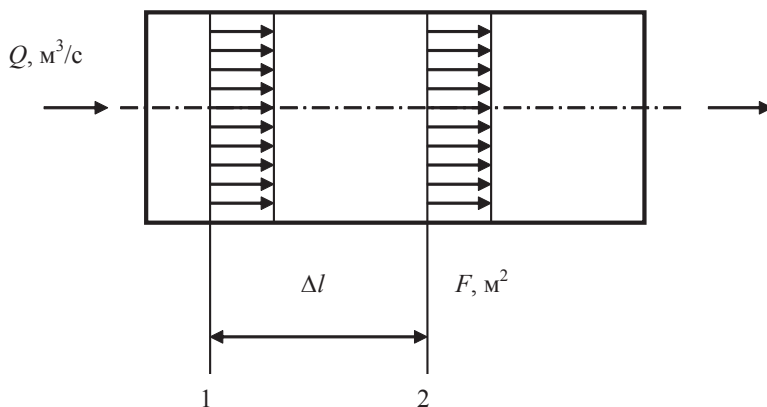
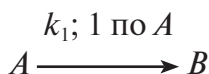


Рис. 23. Поток идеального вытеснения

Другое название модели идеального вытеснения — поршневой поток.

Для моделирования кинетики в потоке идеального вытеснения вполне годится подход, применимый к системам, изолированным по веществу.

Рассмотрим реакцию первого порядка, которая проходит в аппарате идеального вытеснения:



Объемный расход смеси, подаваемой в реактор, равен  $Q$ , объем реактора  $V_a$ , концентрация вещества  $A$  на входе в реактор равна  $C_{A0}$  (рис. 24).

Создадим модель, позволяющую рассчитать выходную концентрацию  $A$ . Константа скорости химической реакции известна, порядок первый. Кинетическое уравнение, выражающее зависимость скорости химической реакции от концентрации, будет иметь вид

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A.$$

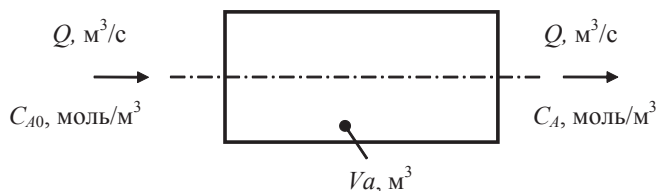


Рис. 24. Химическая реакция в потоке идеального вытеснения

Начальные условия для решения этого дифференциального уравнения выбираем следующими:  $[t = 0, C_A = C_{A0}]$ . Это означает, что в момент начала реакции на входе в реактор концентрация  $A$  известна и равна  $C_{A0}$ .

Проинтегрируем уравнение, предварительно разделив переменные, для чего умножим левую и правую часть на  $dt/C_A$ . Пределы интегрирования подставим, используя начальные условия,

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = -k \int_0^t dt.$$

Полученное решение не отличается от рассмотренного выше для системы, изолированной по веществу,

$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-kt}.$$

В пределах аппарата идеального вытеснения концентрация вещества не остается постоянной — она падает от концентрации в точке входа до концентрации в точке выхода.

Аппаратом *модели идеального перемешивания* является, например, печь КС, гидрометаллургический реактор для выщелачивания, снабженный мешалкой.

Допущения в модели идеального перемешивания следующие:

- поток стационарный, объемный расход вещества через аппарат должен быть постоянным;
- концентрация во всех точках аппарата идеального перемешивания одинакова.

Следствием второго допущения является то, что концентрация вещества в точке выхода равна концентрации внутри аппарата

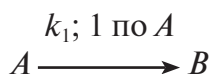
$$\bar{t} = \frac{Va}{Q}.$$

Среднее время пребывания вещества в аппарате —  $\bar{t}$ . Время пребывания различных порций потока в аппарате идеального перемешивания неодинаково.

Элемент объема в таком аппарате является открытой системой, для данного аппарата не годится подход для замкнутой системы. Для описания кинетики в этом случае используем закон сохранения вещества. Принимаем, что концентрация во всех точках внутри аппарата одинакова. На основании закона сохранения вещества запишем уравнение материального баланса для всего аппарата в целом (в единицу времени)

$$\text{Приход вещества} - \text{Расход вещества} = 0.$$

Пусть в условиях аппарата идеального перемешивания происходит реакция разложения вещества  $A$  первого порядка:



Предположим, что аппарат представляет собой бак с мешалкой (рис. 25), в который поступает раствор, содержащий вещество  $A$ .

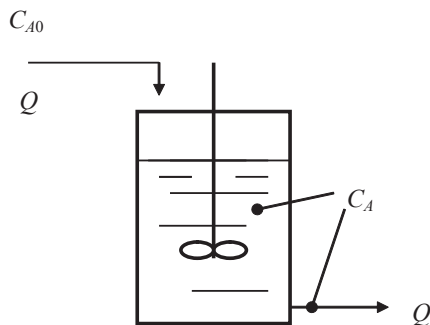


Рис. 25. Химическая реакция в потоке идеального перемешивания

Материальный баланс по веществу  $A$  будет суммой составляющих

$$\underbrace{QC_{A0}}_1 - \underbrace{QC_A}_2 - \underbrace{kC_A V_a}_3 = 0 \quad | : Q \neq 0,$$

где 1-е слагаемое — число молей вещества  $A$ , вносимое в аппарат потоком в единицу времени; 2-е слагаемое — унос вещества из аппара-

та в единицу времени; 3-е слагаемое — масса вещества, израсходованного в химической реакции.

Разделим обе части уравнения на величину объемного расхода  $Q \neq 0$ :

$$C_{A0} - C_A - kC_A \bar{t} = 0,$$

$$C_{A0} - C_A(1 + k\bar{t}) = 0,$$

откуда

$$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k\bar{t}}.$$

Создадим для химических реакций одинаковые условия в том и другом аппарате. Пусть  $C_{A0} = 1$  моль/м<sup>3</sup>,  $Va = 1$  м<sup>3</sup>,  $Q = 1$  м<sup>3</sup>/с. Выберем такую температуру, при которой значение константы скорости будет равно единице. Время пребывания вещества в реакторе также равно единице, тогда

$$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k\bar{t}} = \frac{1}{2} \quad C_A = C_{A0} \cdot e^{-k\frac{Va}{Q}} = 1/e.$$

Удивительно то, что результат одной и той же химической реакции оказывается в разных аппаратах разным. Более эффективным является аппарат идеального вытеснения, в котором выходная концентрация оказывается ниже. Причиной этого является не скорость химической реакции (она одинакова в обоих аппаратах), а наличие или отсутствие перемешивания элементов потока. В аппарате идеального перемешивания на выходе установится концентрация, являющаяся результатом перемешивания порций вещества, находившихся внутри аппарата в течение разного времени. Некоторые порции вещества проскакивают аппарат быстро, и продолжительность реакции в таких порциях мала, а концентрация вещества  $A$ , напротив, высока. Другие порции вещества находятся внутри аппарата достаточно долго, продолжительность химической реакции велика, а остаточная концентрация  $A$  мала.

*Вячеечной модели потока* реальный технологический аппарат заменяется идеализированной схемой — последовательностью ячеек идеального перемешивания (рис. 26).

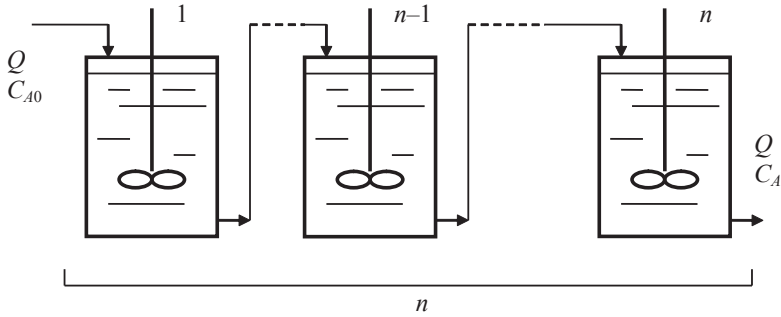


Рис. 26. Ячеечная модель потока

Пусть число ячеек  $n = 2$ , тогда на выходе из 1-й ячейки

$$C_{A1} = \frac{C_{A0}}{1 + k\bar{t} / 2};$$

$$C_{A2} = \frac{C_{A1}}{1 + k\bar{t} / 2} = C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k\bar{t} / 2} \cdot \frac{1}{1 + k\bar{t} / 2} = \frac{C_{A0}}{(1 + k\bar{t} / 2)^2}.$$

Если  $n$  ячеек, то  $C_A = \frac{C_{A0}}{(1 + k\bar{t} / n)^n}.$

Учитывая, что  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{(1 + k\bar{t} / n)^n} = e^{-k\bar{t}}$ , получаем при  $n = \infty$  уже из-

вестное решение для аппарата идеального вытеснения. При  $n = 1$  имеем решение для аппарата идеального перемешивания.

Покажем на графиках (рис. 27), как увеличение количества ячеек влияет на эффективность аппарата. Для аппарата идеального перемешивания выходная концентрация выше, чем для аппарата идеального вытеснения. Пусть начальная концентрация вещества на входе в аппараты равна единице. Объемы аппаратов и объемный расход поступающего вещества таковы, что время пребывания вещества также равно единице. Если константа скорости химической реакции в том и другом аппарате равна единице, то выходная концентрация вещества в аппарате идеального вытеснения будет  $1/e \approx 0.37$ , а в аппарате идеального перемешивания она достигнет значения 0.5 (рис. 27, а).

При увеличении количества ячеек эффективность аппаратов становится практически одинаковой (рис. 27, б).

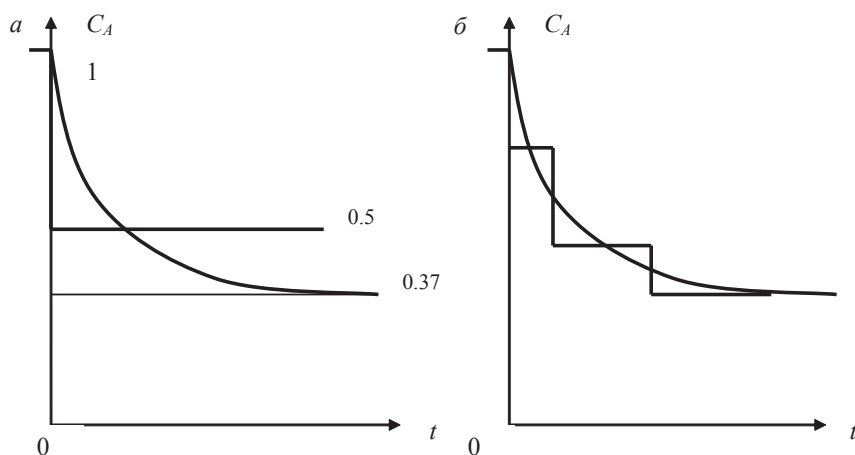


Рис. 27. Сравнение эффективности аппаратов идеального вытеснения и идеального перемешивания:

$a$  — число ячеек равно 1;  $b$  — число ячеек стремится к бесконечности

Чтобы исключить продольное перемешивание в потоке и увеличить эффективность, объем аппарата секционируют, устанавливая перегородки внутри рабочего пространства. Перегородки позволяют осуществить продольное движение потока, а в пределах секции аппарат представляет собой ячейку идеального перемешивания. Применяют также каскадирование аппаратов — последовательное соединение технологических аппаратов.

## 2.14. Моделирование явлений тепло- и массопереноса

Для технологических процессов характерными являются гетерогенные химические реакции. В таких реакциях участвующие вещества находятся в разных фазах, собственно химическая реакция осуществляется на поверхности их раздела. Доставка реагентов к поверхности реагирования и отвод продуктов реакции в соответствующие фазы осуществляется в результате массопереноса.

Рассмотрим взаимодействие сульфида железа, одного из компонентов медного штейна, с дутьем и флюсом в условиях конвертиро-



вания медного штейна (рис. 28). В первом периоде конвертирования медного штейна эта реакция является основной:

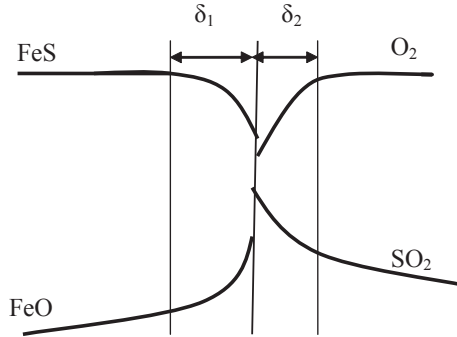
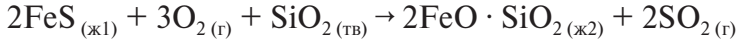


Рис. 28. Схема переноса вещества при окислении сульфида железа в расплаве

Пусть  $C_{\text{я}}$  — концентрация в ядре фазы вдали от межфазной границы. У поверхности раздела фаз концентрация этого вещества иная, обозначим ее как  $C_{\text{п}}$  — поверхностную концентрацию.

Перенос вещества из объема фазы к поверхности реагирования осуществляется в соответствии с законом Фика

$$r_g = \frac{D}{\delta}(C_{\text{я}} - C_{\text{п}}); \frac{D}{\delta} = \beta,$$

где  $D$  — коэффициент диффузии;  $\delta$  — толщина диффузионного слоя;  $(C_{\text{я}} - C_{\text{п}})$  — движущая сила процесса, разность концентраций.

При заданных условиях (например температуре), известном характере химической реакции, известных размерах частиц диффундирующих веществ величина коэффициента диффузии  $D$  постоянна и определяется характером диффундирующих частиц и среды. Толщина диффузионного слоя  $\delta$  зависит от гидродинамического режима при взаимном движении фаз. Отношение  $D/\delta = \beta$  называется константой скорости диффузии. Возникает диффузионный поток, при этом  $r_g$  — число молей вещества, доставляемых диффузией в зону реакции и отнесенных к единице поверхности, обозначение этой величины [моль/(м<sup>2</sup>·с)]. Скорость химической реакции  $r_{\text{х.р}} = kC_{\text{п}}$ , где  $k$  — кинетическая (истинная) константа скорости;  $C_{\text{п}}$  — поверхностная концентрация. Поскольку поверхностную концентрацию экспери-

ментально определить практически невозможно, величину скорости рассчитывают по известной величине концентрации вещества в объеме фазы  $C_{\text{я}}$ , при этом используют так называемую кажущуюся (эмпирическую) константу скорости  $k'$ . Для реакции 1-го порядка

$$kC_{\text{п}} = \beta (C_{\text{я}} - C_{\text{п}}).$$

Заменим  $kC_{\text{п}}$  на  $k'C_{\text{я}}$ ; концентрация в объеме  $C_{\text{я}}$  известна, тогда

$$k'C_{\text{я}} = \beta (C_{\text{я}} - C_{\text{п}}).$$

Проведя преобразования, получим

$$1/k' = 1/k + 1/\beta.$$

Величина, обратная экспериментальной константе скорости, является суммой обратных величин истинной константы и константы диффузии. При осуществлении химической реакции возможны различные соотношения величин констант скоростей и констант диффузии:

- $\beta \gg k$  — наблюдается быстрая диффузия при относительно медленной химической реакции. Скорость гетерогенной реакции определяется скоростью химической реакции. Кинетический режим. Концентрация в объеме фазы незначительно отличается от поверхностной,  $C_{\text{я}} \approx C_{\text{п}}$ , значения истинной и кажущейся констант скорости практически совпадают  $k' \approx k$ ;
- $\beta \ll k$  — быстрая химическая реакция при медленной диффузионной стадии. Лимитирующая стадия диффузионная, при этом концентрация вблизи поверхности практически равна нулю (все вещество успевает прореагировать). Кажущаяся константа скорости по величине равна константе диффузии  $k' = \beta$ . Диффузионный режим;
- $\beta = k$ , скорости химической реакции и диффузии сопоставимы по своим значениям, переходный режим. Это наиболее сложный случай.

В реальных задачах моделирования определение константы диффузии и кинетической константы скорости представляет собой сложную задачу. Кинетическая константа скорости определяется экспериментально, для расчета констант диффузии используются критериальные уравнения.

## 2.15. Моделирование тепловых явлений

---

Технологические процессы представляют собой совокупность химических реакций, сопровождающихся тепловыми эффектами. Процессы тепловыделения и теплопоглощения, а также теплообмена с внешней средой должны учитываться при моделировании.

По особенностям тепловых процессов технологические аппараты, как объекты моделирования, могут быть отнесены к одному из трех типов: 1) изотермическому; 2) адиабатическому; 3) с частичным теплообменом.

По ходу технологического процесса за счет происходящих химических реакций либо образуется некоторое количество избыточного тепла, либо поглощается некоторое количество тепла извне. Количество выделившегося или поглощенного тепла в единицу времени зависит от скорости химической реакции.

Технологические аппараты в большинстве случаев обмениваются теплом с внешней средой, таким образом избыточное тепло путем теплообмена отдается внешней среде.

Тип аппарата определяется тем, как соотносятся между собой тепловые эффекты, связанные с химической реакцией, идущей внутри аппарата, и с возможностями теплообмена с внешней средой.

В *изотермическом* аппарате в единицу времени количество выделившегося и поглощенного тепла невелико, поскольку невелика скорость химической реакции либо мал ее тепловой эффект. Количество тепла, отводимое во внешнюю среду в единицу времени, во много раз превышает количество тепла, выделяющегося внутри аппарата. Температура в аппарате не отличается от температуры внешней среды и остается постоянной.

В *адиабатическом* аппарате возможности внешнего теплообмена значительно уступают тепловому эффекту внутри аппарата. Такой аппарат подобен термосу: выделяющееся в ходе химической реакции тепло практически полностью расходуется на нагрев содержимого внутри аппарата, во внешнюю среду потери незначительны.

Тепловой эффект внутри аппарата с *частичным теплообменом* сопоставим с возможностями теплообмена. Если в аппарате идет экзотермический процесс, часть тепла успевает рассеяться во внешнюю среду, часть расходуется на разогрев содержимого реактора, таким об-

разом устанавливается новая температура внутри аппарата, соответствующая тепловому балансу.

## 2.16. Тепловая работа аппарата с частичным теплообменом

Рассмотрим аппарат идеального вытеснения, в котором идет экзотермическая реакция. Схема аппарата приведена на рис. 29.

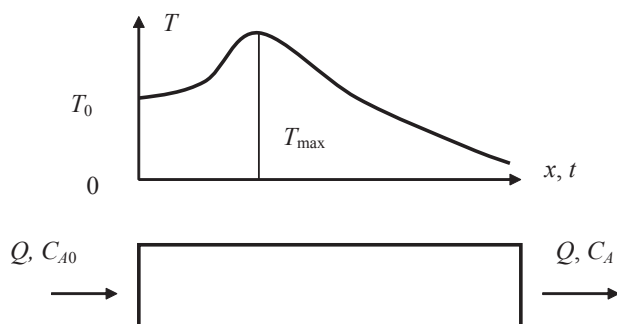


Рис. 29. Экзотермическая реакция в аппарате идеального вытеснения

Пусть  $Q_i$  — тепловой эффект реакции;  $r_i$  — скорость химической реакции.

Тепловой баланс определяется в соответствии с уравнением

$$\frac{dT}{dt} = \underbrace{\frac{1}{\rho C_T} \sum_{i=1}^n Q_i^p \cdot r_i}_1 - \underbrace{\frac{kf}{\rho C_T} (T - T_c)}_2,$$

где  $dt$  — приращение времени; 1 — количество тепла, выделившегося в единицу времени; 2 — количество тепла, теряемое с поверхности аппарата во внешнюю среду;  $\rho$  — плотность вещества в потоке;  $C_T$  — теплоемкость вещества в потоке;  $k$  — коэффициент теплопередачи от потока вещества к внешней среде;  $f$  — удельная поверхность теплопередачи, отношение поверхности аппарата к его объему;  $T$  — текущее значение температуры в произвольный момент времени;  $T_c$  — температура среды.

Приход тепла в тепловом балансе такого аппарата является суммой физического тепла вещества, поступающего в аппарат с потоком,

и тепла, выделяющегося в ходе химической реакции. Расход тепла обусловлен уносом тепла веществом, покидающим аппарат с выходным потоком и потерями в окружающую среду.

Физическое тепло вещества на входе и выходе аппарата определяется его температурой, теплоемкостью и массой. Потери тепла пропорциональны разности температур в аппарате и температуры окружающей среды, а также поверхности теплообмена. Количество выделяющегося тепла зависит от теплового эффекта реакции и пропорционально скорости реакции.

Решение дифференциального уравнения теплового баланса дает функцию изменения температуры от времени пребывания вещества в аппарате. Время пребывания пропорционально расстоянию от точки входа в аппарат до произвольной точки внутри аппарата, для которой мы определяем значение температуры, следовательно, можно построить профиль изменения температуры внутри аппарата.

В случае осуществления экзотермической химической реакции температура по длине аппарата изменяется от начального значения  $T_0$  (в точке входа в аппарат), которое определяется из начальных условий при решении дифференциального уравнения теплового баланса, затем возрастает до некоторого максимума, после чего убывает.

Рост температуры объясняется тем, что количество тепла, выделяющегося в начальный момент реакции, превышает возможности теплообмена с внешней средой. Избыток тепла приводит к увеличению температуры вещества в аппарате.

Скорость химической реакции в начальный момент высока, но поскольку со временем концентрация исходных веществ уменьшается (расходятся исходные вещества), постольку количество тепла, выделяющегося за счет химической реакции в единицу времени, также падает. Когда количество выделяющегося и отводимого тепла становится одинаковым, тогда в некоторой точке аппарата устанавливается максимальная температура. Далее количество выделяющегося тепла становится меньше, чем отводимого. Дефицит тепла в балансе приводит к снижению температуры вещества. На профиле температур в аппарате это отображается падающим участком.

На практике моделирование аппарата с частичным теплообменом такого типа позволяет проверить, не превысит ли максимальная температура допустимых значений. В таком случае необходимо изменить условия теплообмена в критической зоне аппарата, например исполь-

зовать принудительное воздушное или жидкостное охлаждение, что позволит увеличить коэффициент теплопередачи от вещества в аппарате к окружающей среде и количество отводимого тепла.

Рассмотрим работу аппарата с экзотермической химической реакцией в режиме *идеального перемешивания*. Пусть в аппарате (рис. 30) происходит химическая реакция с выделением тепла. Поток вещества с объемным расходом  $Q$  поступает в аппарат.

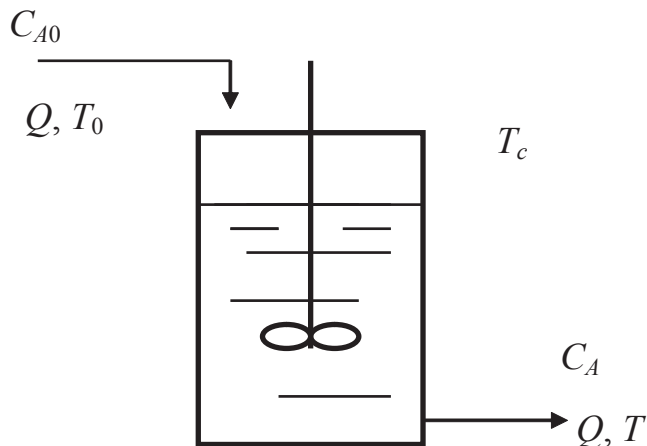


Рис. 30. Экзотермическая реакция в аппарате идеального перемешивания

В установившихся условиях работа аппарата характеризуется тепловым балансом

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 = 0,$$

где  $Q_1$  — количество тепла, поступающего с входящим потоком;  $Q_2$  — выносимого из аппарата выходящим потоком;  $Q_3$  — выделяющегося в ходе химической реакции;  $Q_4$  — теряющегося с поверхности аппарата во внешнюю среду.

$$\underbrace{Q_p C_{T_0} T_0}_{Q_1^T \text{ пришло}} - \underbrace{Q_p C_{T_1} T_1}_{Q_2^T \text{ унос}} + \underbrace{\sum_{i=1}^n r_A Q_T^P}_{Q_3^T \text{ хим. реакция}} - \underbrace{kF(T - T_0)}_{Q_4^T \text{ потери}} = 0.$$

Если известны скорость химической реакции и тепловой эффект, то величина  $Q_3$  известна. Для определения  $Q_1$  достаточно знать тем-

пературу поступающего потока, плотность и теплоемкость вещества. Эти величины обычно известны, следовательно, величина  $Q_1$ , входящая в уравнение теплового баланса, относится к известным. Неизвестными величинами в тепловом балансе являются  $Q_2$  и  $Q_4$ , поскольку для их расчета необходимо решить уравнение теплового баланса и определить температуру вещества в аппарате  $T$ .

Расчет температуры позволяет судить о том, как в тепловом отношении будет работать аппарат при заданных условиях: состав вещества на входе, производительность, начальная температура и геометрические размеры аппарата. На основании таких расчетов можно делать вывод, может ли процесс осуществляться автогенно, требуется ли дополнительный отвод тепла или необходим дополнительный источник тепла (топливо, электроэнергия и др.).

Мы познакомились с моделированием объектов на простейшем молекулярном уровне. Реальные модели процессов и объектов металлургии, как правило, значительно сложнее, они включают в себя элементы описания на более высоких уровнях: малого объема, рабочей зоны аппарата и т. д. Лишь в некоторых частных случаях можно результаты моделирования на молекулярном уровне распространить на уровень технологического аппарата в целом. Так, если химические реакции идут гомогенно, а технологический объект является аппаратом идеального перемешивания, то не требуется его описания на уровне малого объема и рабочей зоны. В этом случае мы можем рассматривать аппарат в целом, как аналог материальной точки в физике, поскольку, например, концентрации и температуры в разных точках внутри аппарата одинаковы.

Создание модели реального процесса или технологического аппарата требует усилий, как правило, коллектива специалистов. Тем не менее главная роль в коллективе на этапе постановки задач, на этапе получения выводов и их трактовки принадлежит специалисту предметной области — инженеру-металлургу. Только инженер-металлург может определять такие элементы, которые могут относиться к существенным сторонам модели.

Построение математической модели технологического объекта позволяет в пределах имеющихся знаний уточнить закономерности, управляющие работой объекта. В этом смысле модель является *инструментом научного познания*, позволяя совершенствовать теоретические знания об объекте.

Модель технологических процессов и объектов представляет собой инструмент, позволяющий *прогнозировать* поведение моделируемых объектов. Под прогнозированием следует понимать возможность расчета выходных характеристик технологического объекта (состав, масса полученного продукта) от известных значений фиксированных входных характеристик и выбранных величин управляющих воздействий. В таком виде модель представляет *инструмент для управления технологическим объектом*, позволяя ответить на вопрос, какие величины управляющих воздействий следует выбрать (и поддерживать) для того, чтобы выходные характеристики технологического объекта приняли желаемые значения.

Наиболее эффективно использование модели для *оптимизации* технологических процессов и объектов, поиска наилучших способов осуществления процессов и конструкций технологических аппаратов.



.....

### 3. Математические методы ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

---

**Т**ехнологические системы в металлургии — искусственные системы, предназначенные для достижения поставленных целей. Общая цель таких систем состоит в переработке сырья, содержащего цветные металлы и сопутствующие ценные составляющие, и в получении продукта с заданными свойствами.

По виду сырья, применяемых технологических приемов, особенностей получаемых продуктов металлургические технологии весьма разнообразны. Однако наличие общей цели позволяет наметить общие подходы к оптимизации таких систем.

Оптимизация предполагает наличие *критериев оптимальности*. Критерии оптимальности характеризуют качество технологического процесса, т. е. степень достижения поставленных целей. К критериям оптимальности предъявляют два важнейших требования:

- критерий должен быть количественным, т. е. выражаться числом. В том случае, когда критерий не имеет ясного количественного смысла, используется метод экспертных оценок;
- критерий должен быть монотонно связан с качеством функционирования технологической системы. Чем лучше качество системы, тем выше значение критерия оптимальности (или наоборот).

Например, критерием оптимальности металлургического процесса часто является извлечение металла в целевой продукт: чем лучше работает технология, тем больше извлечение (меньше потерь металла). Другим критерием оптимальности можно считать удельные затраты энергии или топлива на единицу произведенного продукта. Ясно, что чем лучше работает технология, тем меньше удельный расход энергии или топлива. Но и в первом и во втором случае эта связь монотонна.

Критерии оптимальности по происхождению и смыслу можно разделить на группы:

- технические критерии оптимальности (извлечение металла в целевой продукт, удельная производительность аппарата, удельные затраты энергии и др.);
- технико-экономические критерии (себестоимость продукции, рентабельность и др.);
- экологические критерии (плата за выбросы и сбросы, объемы сточных вод и технологических газов и др.).

Как правило, при постановке оптимизационной задачи не удается сформулировать единственный критерий оптимальности. На начальном этапе реальные оптимизационные задачи практически всегда являются многокритериальными. Решения таких многокритериальных задач часто не являются однозначными: улучшая какие-то критерии оптимальности, мы ухудшаем другие. Математические методы решения оптимизационных задач при наличии нескольких критериев разработаны недостаточно. Поэтому при постановке оптимизационной задачи следует стремиться к формулировке единственного обобщенного критерия оптимальности.

### 3.1. Методы построения обобщенных критериев оптимальности

---

Существует несколько методов построения обобщенных критериев оптимальности.

*Аддитивный метод* позволяет получить обобщенный критерий оптимальности как сумму произведений частных критериев, умноженных на величины весовых коэффициентов,

$$K = \sum_{i=1}^n K_i a_i,$$

где  $K_i$  — частный критерий оптимальности;  $a_i$  — весовой коэффициент при этом критерии.

Весовые коэффициенты имеют положительные и отрицательные знаки в зависимости от того, в каком направлении действует частный критерий оптимальности. Так например, частным критерием оптимальности выбрано извлечение. Понятно, что при весовом коэффи-

циенте выбирается знак плюс, поскольку улучшение частного критерия способствует улучшению обобщенного. Наоборот, если частный критерий — удельные энергозатраты, то знак весового коэффициента уместно выбирать отрицательным: увеличение удельных энергозатрат снижает значение обобщенного критерия оптимальности. Значение весового коэффициента выбирается в зависимости от степени важности частного критерия. Выбор весовых коэффициентов вносит элемент субъективности в формирование обобщенного критерия. Для уменьшения этой субъективной составляющей такой выбор проводят с использованием метода экспертных оценок. Для этого привлекается коллектив экспертов, знающих особенности работы оптимизируемого объекта.

В *мультипликативном методе* обобщенный критерий является произведением частных критериев оптимальности

$$K = \prod_{i=1}^n K_i.$$

Например, сквозное извлечение по технологической схеме переработки сырья без оборотных материалов является произведением величин извлечения по всем стадиям технологической схемы. Аналогом в механике является КПД: для всего механизма он является произведением КПД отдельных частей данного механизма.

При постановке оптимизационных задач следующим шагом является *назначение ограничений*. Не будет преувеличением сказать, что все реальные задачи оптимизации являются задачами с ограничениями. Наличие ограничений способно радикально влиять на результат решения оптимизационной задачи, изменяя его в очень сильной степени, поэтому к выбору ограничений следует подходить весьма серьезно.

Ограничения 1-го рода наложены на входные величины, поэтому являются более простыми.

Ограничения 2-го рода касаются выходных характеристик системы. Они являются более сложными, поскольку требуют ответа на вопрос, какие ограничения 1-го рода (на входные характеристики) требуется установить, чтобы не нарушались ограничения 2-го рода. Примером ограничений 2-го рода являются требования по химическому составу полученного продукта. Обычно они регламентированы соответствующими документами (ГОСТ, технические условия и т. п.). Возника-

ет вопрос, какие ограничения на фиксированные входные характеристики (состав сырья) и управляющие воздействия (время пребывания вещества в аппарате, температура и др.) должны быть приняты, чтобы не нарушались ограничения 2-го рода (т. е. состав полученного продукта соответствовал требуемому)? Разумеется, выбор ограничений — это задача для специалиста, глубоко знающего оптимизируемый технологический процесс.

Следующим этапом постановки задачи является *выбор оптимизирующих факторов*. Выбираются из вектора управляющих воздействий те величины, которые влияют на выход системы и которые мы можем изменять в пределах выбранных ограничений. Большинство задач оптимизации содержат эти ограничения.

В реальных задачах оптимизации технологических систем в цветной металлургии в качестве оптимизирующих факторов могут рассматриваться:

- массовые соотношения между компонентами шихты (соотношение между массами концентратов разных производителей и флюсов различного состава);
- время пребывания вещества в технологическом аппарате (фактически определяет, как полно пройдут необходимые физико-химические превращения компонентов сырья в продукт);
- температура;
- давление;
- условия перемешивания и т. п.

Как и выбор ограничений, выбор оптимизирующих факторов способен выполнить только специалист, глубоко знающий оптимизируемый процесс.

Последним этапом постановки оптимизационной задачи является *формулирование вида целевой функции*. Она является математическим выражением зависимости критерия оптимальности от оптимизирующих факторов. Целевая функция далеко не всегда представляет собой аналитическое выражение этой зависимости, значительно чаще такая связь представляет собой алгоритм вычислений, иногда достаточно сложный, следуя которому мы по известным значениям оптимизирующих факторов можем рассчитать значение целевой функции.

Для решения оптимизационной задачи необходима математическая модель процесса или объекта, который мы оптимизируем.

В математической форме задача оптимизации сводится к следующему:

$$F(x, u, V, t) \rightarrow \max (\min)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 \leq u_1 \leq b_1 \\ a_2 \leq u_2 \leq b_2 \\ \dots\dots\dots \\ a_n \leq u_n \leq b_n. \end{array} \right.$$

Имеются управляющие воздействия  $u_1, u_2, \dots, u_n$ , которые могут изменяться в интервалах разрешенных ограничений  $a_1 \dots b_1, a_2 \dots b_2, \dots, a_n \dots b_n$ . Целевая функция  $F$  отображает зависимость критерия оптимальности от управляющих воздействий  $u_1 \dots u_n$ . Требуется отыскать такие управляющие воздействия  $u_1 \dots u_n$ , которые, с одной стороны, не нарушают ограничений поставленной задачи, а с другой — обращают целевую функцию в максимум или минимум.

Итак, на этапе постановки оптимизационной задачи требуется участие специалиста предметной области — металлурга по цветным металлам, глубоко разбирающегося в особенностях оптимизируемого объекта. Для оптимизации также необходима математическая модель оптимизируемого объекта.

Когда оптимизационная задача формализована, т. е. поставлена в математической форме, переходят к выбору математического метода ее решения. Выбор метода определяется свойствами самой оптимизационной задачи: какова задача, таков и адекватный задаче метод решения. Методы решения многих классов оптимизационных задач математически разработаны довольно хорошо, алгоритмы этих методов описаны, на базе известных алгоритмов разработаны многочисленные пакеты прикладных программ для решения оптимизационных задач.

Если знаний металлурга в области оптимизации недостаточно, то на этапе решения оптимизационной задачи следует привлечь к работе специалистов по прикладной математике, программистов и т. д.

В связи с тем, что выбор метода решения задачи зависит от ее свойств, необходимо познакомиться с классификацией оптимизационных задач по их свойствам.

### 3.2. Классификация оптимизационных задач

Все множество оптимизационных задач можно разделить на несколько классов по следующим признакам.

**Вид экстремума целевой функции.** Нас может интересовать поиск максимума или минимума целевой функции. Как известно, переход от поиска минимума к поиску максимума не представляет труда: минимум функции  $y = f(x)$  достигается при тех же условиях, что и максимум функции  $-y = f(x)$ . Таким образом, для смены знака экстремума достаточно целевую функцию умножить на минус единицу. Пример пояснен на рис. 31. Минимум функции  $y = x^2$  достигается при тех же условиях, что и максимум функции  $y = -x^2$ .

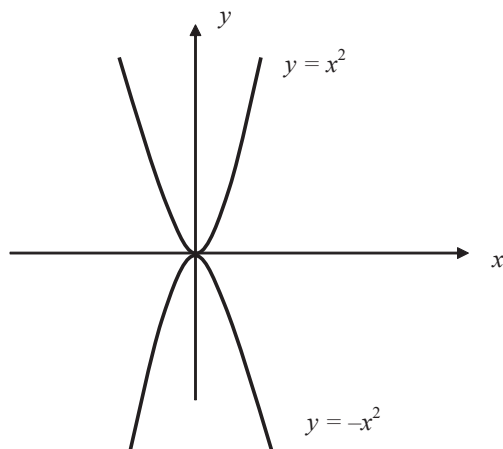


Рис. 31. Результат поиска минимума и максимума целевой функции

**Число критериев оптимальности.** По этому признаку все множество задач оптимизации можно разделить на два подмножества:

- однокритериальные задачи;
- многокритериальные.

В первом случае в задаче может быть сформулирован единственный критерий оптимальности. При необходимости он может быть получен из нескольких частных критериев оптимальности одним из ранее описанных методов (аддитивный, мультипликативный).

Во втором случае в задаче по принципиальным соображениям нет единственного критерия оптимальности. Решение такой задачи часто

бывает неоднозначным, а математические методы решения разработаны хуже, чем для однокритериальных задач. По этой причине всегда имеет смысл попытаться построить единственный критерий оптимальности путем свертки нескольких частных критериев.

**Число оптимизирующих факторов.** Здесь также можно выделить два подмножества:

- однофакторные задачи;
- многофакторные.

В первом случае в задаче имеется единственный оптимизирующий фактор (единственное управляющее воздействие на объект, которое мы можем изменять в заданных пределах). Математически это означает, что целевая функция зависит от значения своего единственного аргумента.

Во втором случае целевая функция зависит от нескольких (двух и более) аргументов. Имеется два и более управляющих воздействия, изменяя которые в заданных пределах независимо друг от друга, мы управляем объектом.

**Наличие ограничений.** Большинство реальных задач содержат ограничения. Наличие ограничений существенно влияет на получение решения оптимизационной задачи. Некоторые задачи можно рассматривать как задачи безусловной оптимизации. В таких задачах ограничения очень широкие и не влияют на результат решения задачи.

**Особенности целевой функции.** Целевая функция может быть задана математически различными способами:

- аналитическим способом  $F = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ . Имеется некое аналитическое выражение, при подстановке в которое значений аргументов может быть определено значение функции;
- алгоритмом, т. е. последовательностью вычислений, в результате выполнения которых определяется значение целевой функции при заданных значениях ее аргументов (оптимизирующих факторов).

Целевая функция может быть линейной или нелинейной относительно оптимизирующих факторов. В задачах линейного программирования, например, целевая функция линейная. Существует много задач с нелинейно-заданной функцией.

Итак, выбор математического метода решения оптимизационных задач зависит от свойств поставленной задачи. К настоящему времени существует достаточно много математических методов решения оп-

тимизационных задач. По особенностям их реализации методы можно объединить в три группы: 1) аналитические; 2) поисковые; 3) экспериментальные.

### 3.3. Аналитические методы решения оптимизационных задач

Для реализации аналитических методов целевая функция должна быть задана аналитически. Аналитические методы могут использоваться для решения однофакторных и многофакторных задач.

**Однофакторные задачи.** Пусть целевая функция зависит от единственного аргумента. Для поиска ее экстремума (скажем, минимума) используем известные приемы математического анализа. Достаточно взять производную функции и приравнять ее к нулю, а затем решить полученное уравнение. Для определения типа экстремума (минимум, максимум или точка перегиба) потребуется также взять вторую производную. Знак второй производной указывает на тип экстремума: положительное значение говорит о том, что найден минимум, отрицательное — максимум функции. Например, ищем минимум функции  $y = 2x^2 + 4x - 8 \rightarrow \min$ . Приравняв к нулю первую производную, получим  $4x + 4 = 0$ , откуда  $x = -1$ .

Аналитический метод для однофакторных задач предъявляет высокие требования к целевой функции: она должна быть задана аналитически и иметь 1-ю и 2-ю производные. В этом случае поиск решения может быть осуществлен методами математического анализа.

**Многофакторные задачи.** В многофакторных задачах целевая функция зависит от двух и более аргументов.

$F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  — функция нескольких переменных ( $n$  больше или равно 2). Пусть, например, аналитическое выражение целевой функции имеет следующий вид:

$$y = 2x_1^2 + 3x_2^2 + 4x_1 + 5x_2 - 16.$$

Возьмем частные производные функции по ее аргументам и приравняем их к нулю

$$\frac{\partial y}{\partial x_2} = 0, \quad \frac{\partial y}{\partial x_1} = 0.$$



Получим систему уравнений

$$4x_1 + 4 = 0;$$

$$6x_2 + 5 = 0.$$

Решение системы определяет условия экстремума целевой функции:  $x_1 = -1$ ;  $x_2 = -5/6$ .

Аналитические методы для решения многофакторных задач используются крайне редко по следующим причинам:

- функция должна быть задана аналитически и иметь 1-ю и 2-ю производные;
- в ходе решения задачи можно прийти к системе нелинейных уравнений, которую все равно придется решать численными, приближенными методами.

### 3.4. Поисковые (численные) методы решения однофакторных оптимизационных задач

---

Для использования этих методов необязательно, чтобы целевая функция была задана аналитически. Единственное требование — она должна быть вычислимой, т. е. должен быть известен способ ее вычисления (аналитическое выражение или алгоритм вычисления). Полученное решение может быть найдено с любой заданной нами точностью. Точность решения определяется лишь последующим использованием его результатов.

Например, в ходе решения мы определяем оптимальную температуру проведения металлургического процесса. Понятно, что точность решения в несколько градусов нас устроит, поскольку на практике мы не сможем поддерживать температуру в печи с большей точностью, ведь регулятор температуры имеет некоторые погрешности измерения и регулирования.

Для получения решения численным методом необходимо:

- задать способ вычисления целевой функции (алгоритм или аналитическое выражение)  $y = f(x) \rightarrow \min$ ;
- все поисковые методы приближенные, поэтому перед началом решения следует задать интересующую нас точность решения  $\varepsilon$ ;

- выбрать интервал допустимых значений оптимизирующего фактора  $a \leq x \leq b$ .

*Метод перебора (сплошного поиска)* заключается в следующем. Разбиваем ось аргументов на конечное число шагов решения, которое определяется интересующей нас точностью,  $n = \frac{b-a}{\varepsilon}$ . Точ-

ность 1 % от интервала изменения фактора будет соответствовать разбиению интервала на 100 шагов, при точности 5 % потребуется разбить интервал на 20 шагов, и т. д.

Далее проводим вычисления целевой функции в точках, являющихся границами шагов, и запоминаем все результаты вычислений. Сравниваем значения целевой функции, ищем минимальное значение и определяем значение аргумента, соответствующее минимуму целевой функции.

Поиск минимума напоминает поиск наиболее глубокого места в реке. Достоинством данного метода является то, что он позволяет найти глобальное решение на всем интервале, если на нем существует несколько локальных экстремумов. Недостаток — большое количество вычислений целевой функции и, как следствие, низкая скорость. Метод перебора требует запоминания всех вычисленных значений целевой функции и аргументов. На рис. 32 показано применение метода для поиска условий минимума целевой функции.

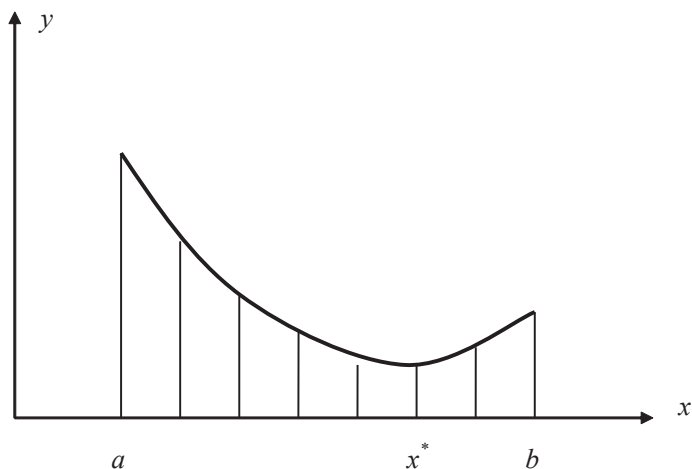


Рис. 32. Результат поиска минимума методом перебора

*Метод дихотомии (половинного деления)* обеспечивает более быстрый поиск. Требования к целевой функции такие же, что и при использовании сплошного поиска.

Разбиваем интервал значений аргумента  $a \leq x \leq b$  пополам  $x_0 = \frac{a+b}{2}$ .

Строим две дополнительные узловые точки с координатами  $x_1 = x_0 + \varepsilon$ ;  $x_2 = x_0 - \varepsilon$  и вычисляем значения целевой функции в этих точках  $y_1 = f(x_1)$ ,  $y_2 = f(x_2)$ , как показано на рис. 33.

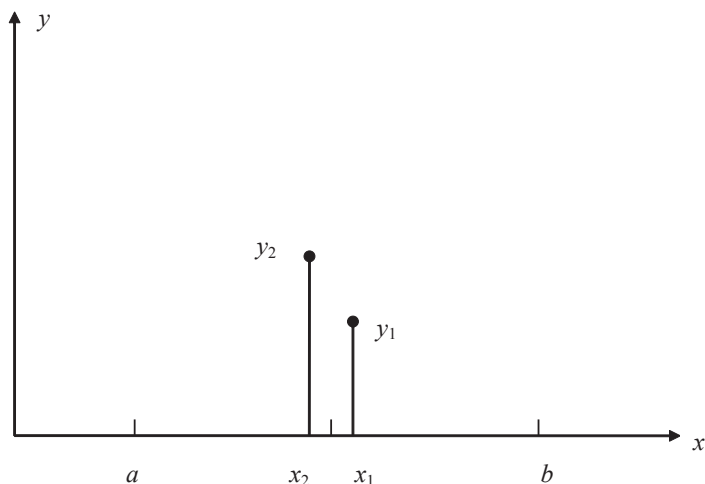


Рис. 33. Результат поиска минимума целевой функции по методу дихотомии

Представим, что функция имеет один минимум на отрезке от  $a$  до  $b$ . Ординаты  $y_1$  и  $y_2$  вычислены в точках, лежащих достаточно близко друг к другу, на расстоянии удвоенной точности решения. Если  $y_2 > y_1$ , поиск минимума на левой половине интервала теряет смысл, и ее можно отбросить. На этом первая итерация решения заканчивается, и после сокращения интервала вдвое задача вновь возвращается к исходной, но и интервал дальнейшего поиска сокращается вдвое.

Для сокращения интервала достаточно перенести точку  $a$  в центр первоначального отрезка, а координату точки  $b$  оставить без изменения.

Далее решение продолжается до тех пор, пока после нескольких итераций сокращенный интервал не станет меньше заданной точности.

Сокращение интервала на каждой итерации происходит вдвое, следовательно, совершив, например, 7 итераций, мы уменьшим первоначальную длину интервала в 128 раз.

чальный интервал в  $2^7 = 128$  раз, достигнув точности решения  $1/128$ , что менее 1 % от первоначального интервала. Если интересующая нас точность решения составляет 1 % от интервала, задача решена.

Поскольку на каждой итерации целевая функция вычисляется дважды, общее количество ее вычислений будет равно 14. При этом нет необходимости запоминать результаты вычислений, в отличие от метода сплошного поиска. К тому же, решая задачу по методу сплошного поиска с более высокой точностью 1 %, мы были бы вынуждены выполнить 100 вычислений целевой функции, и при этом все результаты вычислений надо было бы сохранить. При повышении точности решения различия методов становятся еще больше: при точности 0.5 % метод дихотомии требует 16 вычислений функции, а метод сплошного поиска — 200 вычислений, при точности 0.1 % — 20 и 1000 вычислений соответственно!

Величина интервала по итерациям решения составит:  $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \frac{1}{16}, \frac{1}{32}, \frac{1}{64}, \frac{1}{128}$  от начальной.

Однако метод дихотомии имеет и существенный недостаток. При наличии нескольких экстремумов целевой функции он не обеспечивает поиск глобального решения, позволяя отыскать один из локальных экстремумов.

Если желаем получить глобальное решение, то необходимо использовать метод сплошного поиска. В реальных задачах комбинируют методы.

### 3.5. Поисковые методы решения многофакторных оптимизационных задач

В таких оптимизационных задачах  $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  — целевая функция двух и более аргументов,  $F(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow \min$ .

Рассмотрим наиболее простой случай, когда  $Y = F(x_1; x_2)$  есть функция только двух переменных. Пространство переменных представляет собой плоскость. Точка на плоскости характеризуется координатами по осям  $x_1$  и  $x_2$  (рис. 34).

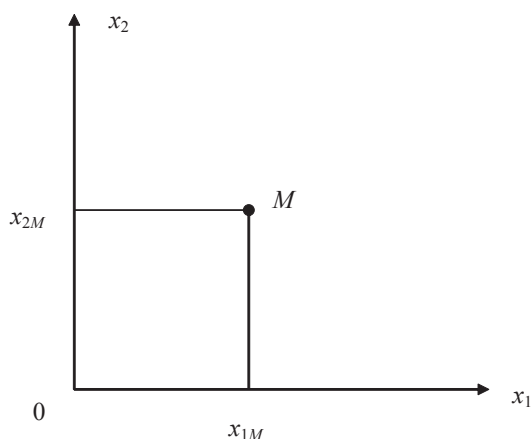


Рис. 34. Функция двух переменных

Поверхность целевой функции является геометрическим местом точек, заданных концами ординат  $Y(M)$ . Поверхность целевой функции может быть изображена проекциями линий сечения плоскостями постоянного уровня. Такие линии называются *линиями постоянного уровня целевой функции*, или просто *линиями уровня* (рис. 35).

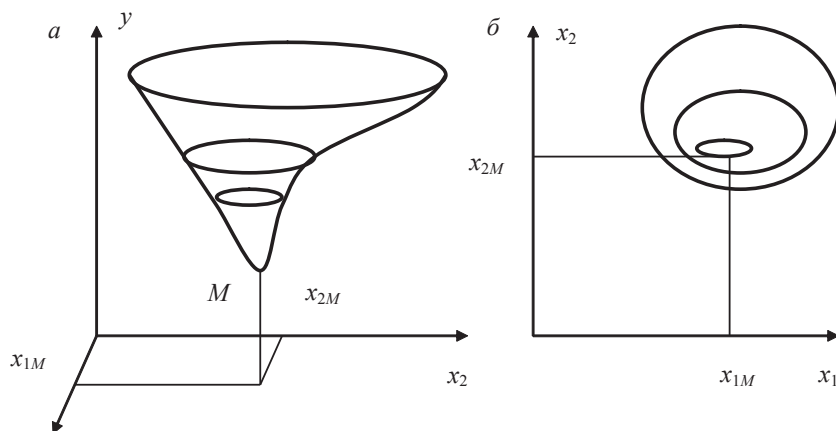


Рис. 35. Поверхность целевой функции двух переменных (а) и ее линии уровня (б)

Требуется найти такие  $x_1$  и  $x_2$ , при которых  $Y \rightarrow \min$ . Предварительно следует установить точность решения ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ), которая определяется тем, как в последующем будут использованы результаты решения. Оптимальные значения технологических параметров, найденные в ре-

зультате решения оптимизационной задачи, необходимо поддерживать при проведении технологического процесса с некоторой точностью, составляющей обычно 0.5 ... 5 % диапазона измерения.

На следующем этапе определяем область допустимых решений оптимизационной задачи. Для этого используют ограничения первого рода, наложенные на величины оптимизирующих факторов. Например, если оптимизирующим фактором некоторого технологического процесса выбрана температура, то ее значения ограничены сверху максимально допустимыми значениями, при которых работоспособен аппарат, или температурой кипения растворов (если аппарат гидрометаллургический). Минимальное значение температуры не может быть ниже температуры окружающей среды (если не используется устройство охлаждения), а также ниже температуры затвердевания или кристаллизации расплава (если аппарат пирометаллургический и предназначен для плавки).

Система ограничений дает возможность в пространстве переменных построить область, внутри и на границах которой выполняются совместно все ограничения задачи. Такая область называется *областью допустимых решений* (ОДР). Для целевой функции двух переменных пространство переменных представляет собой плоскость, а область допустимых решений — часть плоскости, ограниченную прямыми. При трех переменных пространство становится объемным, а область допустимых решений является многогранником, ограниченным плоскостями. Для четырех и более переменных привычных геометрических образов нет — говорят о гиперпространстве переменных и области допустимых решений, ограниченных гиперплоскостями. На рис. 36 показана область допустимых решений при наличии ограничений на оптимизирующие факторы вида  $a_1 \leq x_1 \leq b_1$ ,  $a_2 \leq x_2 \leq b_2$ .

Дальнейшее решение оптимизационной задачи состоит в исследовании области допустимых решений в поисках оптимального решения. При этом надо иметь в виду, что методы решения, описанные ранее для однофакторных задач, не могут быть использованы.

Пусть целевая функция имеет три оптимизирующих фактора. Используя метод сплошного поиска, мы могли бы построить и исследовать область допустимых решений. В нашем случае такая область представляет собой параллелепипед. Предположим, нас интересует точность решения в 1 % от диапазона изменения каждого фактора. Мы могли бы разбить интервал каждого фактора на сто шагов, что

привело бы к пространственной сетке, содержащей сто плоских слоев, в каждом из которых количество узлов составило бы десять тысяч. Таким образом, общее число узлов на области допустимых решений составило бы миллион. Далее следовало бы вычислить целевую функцию в каждом узле и запомнить ее значения, отсортировать их и найти экстремум. Значения факторов в точке экстремума и были бы решением оптимизационной задачи. Однако для получения решения таким путем потребовалось бы слишком много времени, поскольку вычисление целевой функции каждый раз требует некоторых затрат времени. К тому же требуется время на сортировку и поиск оптимального решения, а также огромный объем памяти для хранения результатов вычислений. А если число оптимизирующих факторов (аргументов целевой функции) больше трех, то легко показать, что задача вообще не может быть решена за приемлемое время: пока мы занимаемся ее решением, условия технологического процесса изменятся. Поэтому усилия специалистов в области прикладной математики были сосредоточены в направлении разработки «быстрых» методов решения многофакторных оптимизационных задач. В настоящее время создано несколько групп методов для решения таких задач.

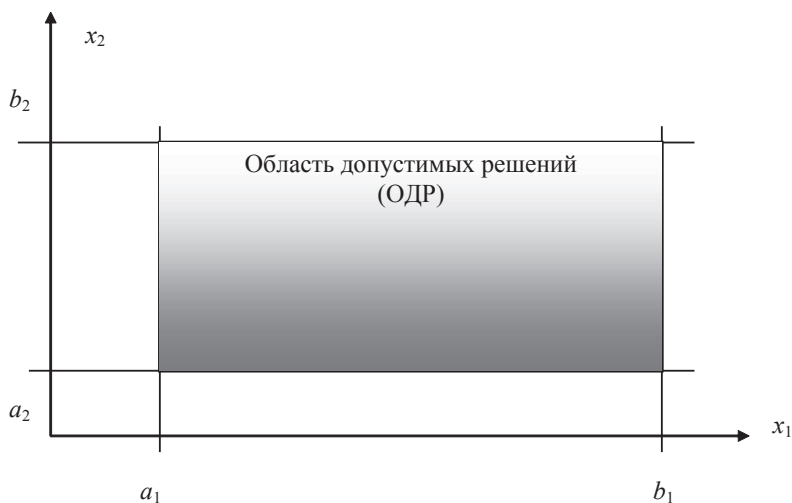


Рис. 36. Область допустимых решений

Математиками разработаны следующие методы для решения многофакторных оптимизационных задач:

- метод координатного спуска;

- градиентные методы;
- симплексные методы.

Для всех трех способов решения задач есть общие требования и отличительные особенности, присущие каждому методу.

Общие требования:

- целевая функция должна быть вычислима (задана аналитически, либо известен алгоритм вычислений, либо имеется таблица табулированных значений);
- все методы являются численными, приближенными, до начала решения должна быть определена точность по каждому из оптимизационных факторов. Достижение заданной точности является критерием завершения поиска.

Поисковые методы *отличаются элементами стратегии поиска*, к которым относятся:

- начальная точка поиска;
- направление поиска;
- величина начального шага;
- способ сокращения начального шага и коэффициент сокращения.

Любой поисковый метод из перечисленных обеспечивает наличие решения, сходимость и, если целевая функция унимодальна (имеет один минимум), то и единственное решение.

*Начальная точка поиска* — любая точка из области допустимых значений решений (ОДР). Она может находиться внутри области, на ее границе или на пересечении границ, т. е. в вершине ОДР.

*Направление поиска* выбирается в каждом методе по-разному, выбор является отличительной особенностью метода.

Идея поисковых методов — движение по области допустимых решений, причем направление и размер начального шага зависят от результатов решения, полученных на предыдущем шаге. При этом для более быстрого получения решения (за меньшее число вычислений) следует выбирать начальный шаг достаточно большим: величина начального шага обычно составляет 20...25 % от интервала изменения фактора.

*Способ и коэффициент сокращения шага* состоит в том, что, двигаясь по ОДР начальным шагом, можно решить задачу с точностью, равной величине начального шага, для практических целей этого недостаточно. Для достижения заданной точности решения требуется продолжить поиск, исследуя область допустимых решений шага-



ми меньшей величины. Последующая величина шагов получается делением начального шага на коэффициент сокращения. Коэффициент сокращения шага выбирают обычно 2...5.

### 3.6. Метод координатного спуска

В данном методе направление поиска совпадает с направлением координат (осями факторов). На любом шаге решения можно менять только один фактор, а все остальные остаются без изменения. Поиск решения методом координатного спуска поясняется на рис. 37.

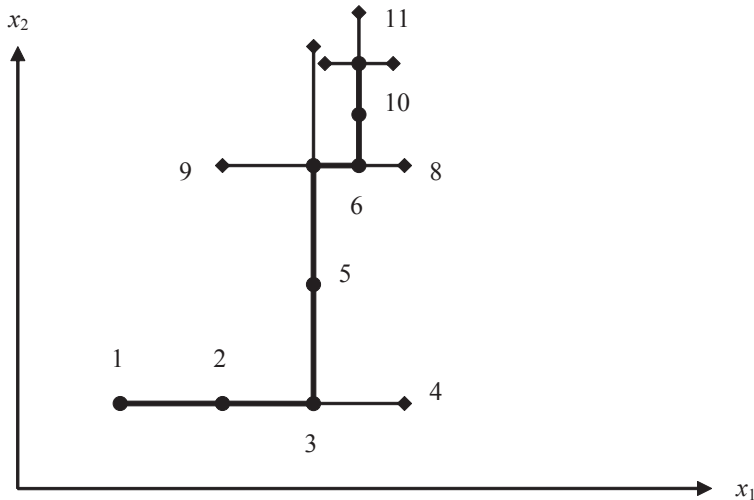


Рис. 37. Результат поиска минимума методом координатного спуска

Поиск решения начинается в начальной точке 1, где вычисляется первое значение целевой функции. Затем начинаем движение по пространству переменных в пределах области допустимых решений. Это означает, что, увеличив координату на величину начального шага вдоль  $x_1$  и оставив без изменения  $x_2$ , мы переместимся в новую точку 2. Вычислим значение целевой функции в этой точке и сравним его с предыдущим. Если при поиске минимума значение функции в точке 2 меньше, чем в точке 1, то такой шаг следует считать *удачным*. В таком случае поиск продолжается в выбранном направлении. Дви-

гаясь вдоль  $x_1$  и вычисляя на каждом шаге значение целевой функции, мы рано или поздно можем убедиться в том, что последующее значение станет больше предыдущего. Такой шаг является *неудачным*. Если очередной шаг решения оказался неудачным, направление поиска изменяется. Для этого координату последней удачной точки по  $x_1$  фиксируют и начинают движение в направлении  $x_2$ , используя величину начального шага. Вблизи области минимума движение начальным шагом во всех разрешенных направлениях не приводит к улучшению значения целевой функции. При этом одна из точек окажется наилучшей — в ней значение целевой функции наименьшее. Однако задача еще не решена, поскольку величина начального шага выбирается заведомо больше интересующей нас точности решения. Фактически задача пришла к исходной: имеется начальная точка поиска (наилучшая) и требуется путем движения по пространству переменных найти такую точку, в которой значение целевой функции еще меньше. Для этого последующий поиск надо проводить, двигаясь шагом уменьшенной величины. Такой шаг получают делением начального шага на коэффициент сокращения шага. Разделив начальные шаги на соответствующие коэффициенты сокращения, продолжают поиск, пока одна из точек вновь не станет наилучшей, и т. д. Критерием завершения поиска является достижение заданной точности решения.

### 3.7. Градиентные методы

Градиентные методы отличаются от предыдущего некоторыми элементами стратегии, в частности выбором направления поиска. Известно, что *градиент функции* — это вектор, указывающий направление наискорейшего возрастания функции из данной точки пространства ее переменных. Противоположно направленный вектор антиградиента функции указывает направление наискорейшего ее убывания из данной точки.

Направление поиска в случае минимизации целевой функции совпадает с направлением антиградиента. Пусть имеется  $Y = F(x_1; x_2)$ , тогда

$$\overline{\text{grad } Y} = \frac{\partial F}{\partial x_1} \overline{H}_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} \overline{H}_2,$$

где  $\frac{\partial F}{\partial x_1}$  — частная производная целевой функции  $F$  по ее аргументу  $x_1$ ;

$\frac{\partial F}{\partial x_2}$  — частная производная целевой функции  $F$  по ее аргументу  $x_2$ ;

$H_1$  и  $H_2$  — единичные направляющие векторы (орты), направление которых совпадает с направлением осей факторов  $x_1$  и  $x_2$ , а модуль равен единице.

Для отыскания положения вектора градиента можно воспользоваться следующим приемом (рис. 38). Заменим величины производных отношением конечных разностей. Такая замена корректна, если приращения аргументов функции являются малыми (теоретически — бесконечно малыми) величинами. Приращения аргументов выберем равными точности нашего решения, поскольку она достаточна мала по сравнению с исходными интервалами изменения аргументов функции:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} \approx \frac{\Delta F'}{\Delta x_1} = \frac{Y_M - Y_N}{\varepsilon_1},$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} \approx \frac{\Delta F''}{\Delta x_2} = \frac{Y_M - Y_P}{\varepsilon_2}.$$

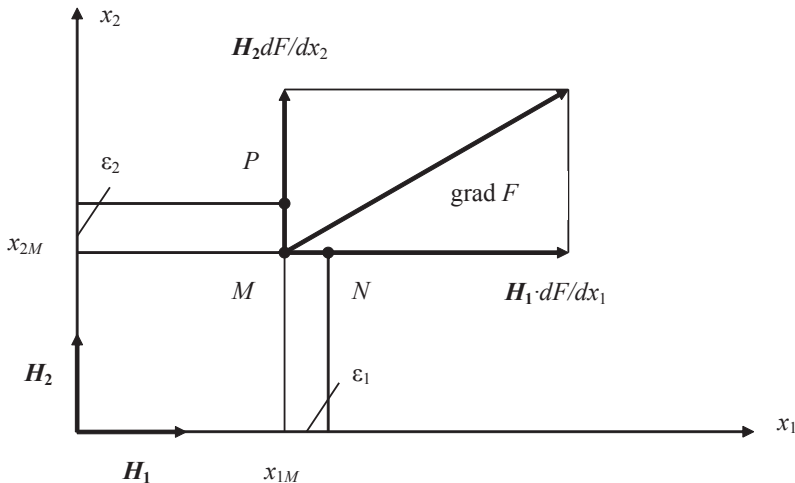


Рис. 38. Определение направления градиента функции

Для вычисления приращений функции в направлении осей ее аргументов построим две дополнительные точки  $N$  и  $P$ , лежащие вблизи начальной точки поиска  $M$  на расстояниях  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  соответственно. Вычислим значения целевой функции в этих точках, а затем вычислим приращения в направлении аргументов.

Умножив величины частных производных на направляющие векторы, получим два вектора, направления которых совпадают с осями факторов, а модули пропорциональны величинам частных производных. Построив векторную сумму этих векторов, определим направление градиента. Антиградиент при поиске минимума — это противоположно направленный вектор, имеющий одинаковый с ним модуль.

Поиск оптимального решения начинается в начальной точке. Затем мы перемещаемся по направлению градиента на величину начального шага. В новой точке поиска вычисляем значение функции и сравниваем его с предыдущим. Если очередной шаг оказался удачным, то перемещаемся в следующую точку поиска по направлению градиента. Поверхность нелинейной целевой функции криволинейна, и направление ее градиента в разных точках пространства переменных будет разным. Возможно, что очередной шаг решения оказался неудачным, это означает, что направление градиента существенно отклонилось от первоначального. В таком случае из последней удачной точки следует вновь определить направление градиента функции и продолжить поиск в новом направлении. Если же при этом первый шаг сразу будет неудачным, то продолжить поиск следует шагом уменьшенного размера, разделив начальный шаг на коэффициент сокращения. Как и в предыдущем случае, критерием завершения поиска является достижение заданной точности: при уменьшении шага область поиска сокращается, и когда она достигнет размеров, соответствующих заданной точности, поиск останавливается.

В отличие от координатного метода, траектория поиска сразу выводит нас в область экстремума функции. При использовании градиентного метода требуется меньшее количество вычислений функции, т. е. поиск осуществляется быстрее.

Градиентные методы обеспечивают быстрое решение, но его продолжительность зависит от выбора начальной точки и вида поверхности целевой функции. В некоторых случаях неудачный выбор начальной точки или особенности целевой функции могут привести к тому, что градиентные методы оказываются даже хуже координатного.

### 3.8. Симплексные методы

Для реализации симплексных методов требуется, чтобы целевая функция была вычислима, должны быть заданы точность решения и начальный размер симплекса. Отличительной особенностью является направление поиска.

Поиск решения осуществляется с использованием симплекса.

*Симплекс* — геометрический комплекс, имеющий  $(n+1)$  вершину, где  $n$  — число факторов оптимизационной задачи. Для функции двух переменных  $n = 2$ , а симплекс представляет собой треугольник в плоском пространстве переменных. Если этот треугольник равносторонний, то метод поиска называется *методом регулярного симплекса*. Когда начальный размер симплекса известен и равен  $R$ , координаты всех его вершин легко определить, если заданы координаты любой вершины. Пусть вершина  $A$  является начальной точкой поиска. Начиная поиск, определим координаты двух других вершин симплекса (табл. 3) и вычислим значения целевой функции во всех трех вершинах (рис. 39).

Таблица 3

Координаты вершин начального симплекса

Вершина	Координата	
	$x_1$	$x_2$
$A$	$x_{10}$	$x_{20}$
$B$	$x_{10} + R/2$	$x_{20} + \frac{R\sqrt{3}}{2}$
$C$	$x_{10} + R$	$x_{20}$

Сравним значения функции между собой и определим наихудшее (при поиске минимума — наибольшее, при поиске максимума — наименьшее). Дальнейший поиск следует предпринимать в направлении, противоположном той вершине, в которой наблюдается наихудшее значение функции. Для этого используется процедура отражения: ищем точку, зеркально отражая наихудшую вершину через противоположную сторону симплекса.

Получаем новый симплекс, две из трех вершин которого принадлежат старому. Рассчитываем значение целевой функции в новой вер-

шине и сравниваем его со значениями в двух других вершинах нового симплекса (эти значения были рассчитаны на предыдущем шаге решения). Вновь определяем наихудшее значение функции на новом симплексе, проводим процедуру отражения и ищем вершину следующего симплекса.

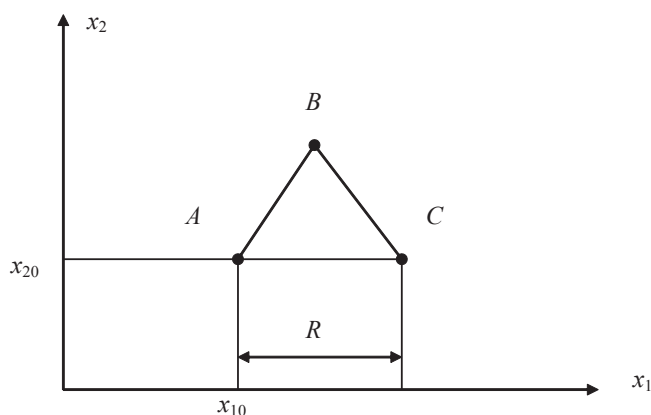


Рис. 39. Начальный симплекс

Продолжая движение таким способом, мы неизбежно придем в область экстремума целевой функции, где использование процедуры отражения приведет к вращению симплекса вокруг одной из его вершин. Если симплекс начал вращение и совершил (путем последовательных отражений вершин) полный оборот, то улучшить значение функции при движении симплекса начального размера уже не удастся. Необходимо уменьшить размер симплекса, разделив начальный размер на коэффициент сокращения, и продолжить решение задачи до достижения заданной точности.

Существует *метод деформируемого симплекса*, в котором отражение наихудшей вершины происходит через «центр тяжести» предыдущего симплекса. При использовании деформируемого симплекса поиск решения происходит еще быстрее по сравнению с методом регулярного симплекса.

Реальные поисковые оптимизационные задачи решаются с применением разных методов. Если в таком случае решения совпадают, то это увеличивает надежность. Поисковые методы не являются глобальными, поэтому, если в ОДР существует два и более минимума, мы можем получить локальное решение вместо глобального (рис. 40).

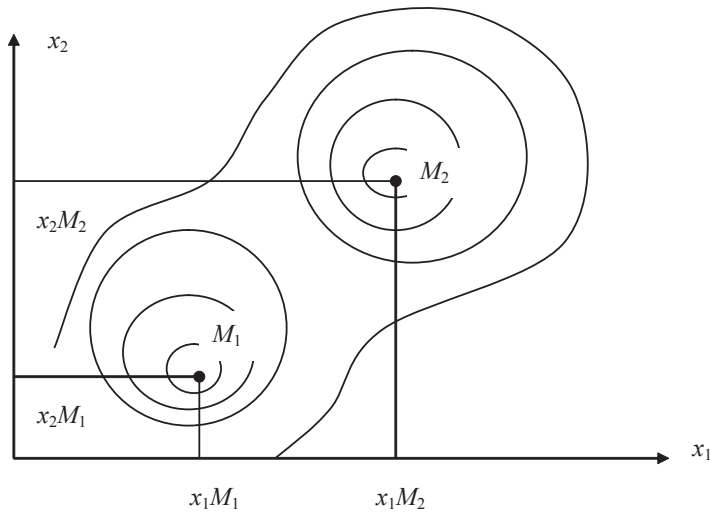


Рис. 40. Локальное и глобальное решение

На рис. 40 показано, что существует два минимума целевой функции в точках  $M_1$  и  $M_2$ , причем  $Y(M_2) < Y(M_1)$ , глобальный минимум в точке  $M_2$ .

То, какой из экстремумов мы обнаружим, зависит от выбора начальной точки. Поэтому используют не только разные методы поиска, но и проводят поиск из разных начальных точек.

### 3.9. Экспериментальные методы оптимизации

Как в аналитических, так и в поисковых методах требуется, чтобы целевая функция была вычислимой. Фактически это означает, что мы должны иметь модель оптимизируемого объекта. Во многих случаях такой модели нет. Остается использовать экспериментальные методы оптимизации, в которых вместо вычисления целевой функции ее значения определяются в эксперименте путем измерений при заданных значениях оптимизирующих факторов.

В экспериментальных методах решение должно достигаться за возможно меньшее число определений самой функции, поскольку вычислить функцию значительно проще (и быстрее), чем поставить эксперимент и измерить значение целевой функции. При экспериментальной

оптимизации используются методы, аналогичные поисковым методам оптимизационных задач. Вся разница в том, что на каждом шаге решения вместо вычисления функции потребуется задать соответствующее значение оптимизирующих факторов, провести эксперимент и определить величину целевой функции.

Аналогом координатного метода в экспериментальной оптимизации является метод Гаусса — Зайделя. Условия экспериментов в методе Гаусса — Зайделя выбираются так, что в каждом последующем опыте изменяется один оптимизирующий фактор, а все остальные имеют фиксированное значение. Траектория поиска при использовании этого метода представляет собой ломаную линию в пространстве переменных, отрезки этой линии параллельны осям координат.

Особенности градиентного метода поиска в экспериментальной оптимизации реализованы в методе Бокса — Уилсона. Основная идея метода состоит в определении направления градиента целевой функции и по направлению градиента перемещения в область экстремума с последующим уточнением положения экстремума. Траектория поиска в этом методе более короткая, решение достигается при меньшем числе опытов.

Симплексный метод в экспериментальной оптимизации практически воспроизводит поисковый метод и носит то же название. Отличие здесь только в том, что в поисковом методе целевая функция вычисляется, а в экспериментальном методе она определяется в опыте путем измерений.

### 3.10. Методы линейного программирования

---

Задачи линейного программирования представляют частный случай задач оптимизации с целевыми функциями, зависящими от нескольких факторов. В задачах линейного программирования целевая функция зависит линейно от своих аргументов.

Известно несколько типов задач линейного программирования:

- шихтовая задача;
- задача об использовании ресурсов;
- транспортная задача;
- задача о составлении расписаний.



*Шихтовая задача* состоит в следующем. Например, медеплавильный завод перерабатывает шихту, состоящую из нескольких медно-цинковых концентратов, полученных на разных обогатительных фабриках. Химический состав концентратов по основным компонентам и их стоимость приведены в табл. 4. Содержание меди, цинка и серы в полученной шихте должно соответствовать технологическим требованиям, также указанным в табл. 4.

Таблица 4

Шихтовая задача

Производитель концентрата	Содержание в концентрате, %			Цена концентрата, тыс. р. за тонну
	Cu	Zn	S	
Учалинский	16	4	34	11
Бурибайский	12	5	32	13
Гайский	20	3	33	17

*Примечание.* Допустимое содержание в шихте (смеси концентратов), %: Cu не менее 17; Zn не более 3.5; S не менее 32.

Требуется определить, какова должна быть доля каждого из концентратов в шихте минимальной стоимости, пригодной к дальнейшей переработке.

Обозначим доли концентратов в шихте как  $x_1, x_2$  и  $x_3$ . Значения этих переменных должны быть неотрицательны, а их сумма равна единице.

Стоимость шихты зависит от цены каждого из концентратов и его доли и должна быть наименьшей

$$L = 11x_1 + 13x_2 + 17x_3 \rightarrow \min.$$

Ограничения в данной задаче определяются составом полученной шихты, который должен удовлетворять технологическим требованиям. По условиям нашего примера в шихте должно быть не менее 17 % меди, не более 4 % цинка и не менее 32 % серы. Содержание каждого из элементов в шихте зависит от доли соответствующего концентрата и содержания элемента в нем. Составляем неравенства — ограничения задачи:

$$16x_1 + 12x_2 + 20x_3 \geq 17,$$

$$4x_1 + 5x_2 + 3x_3 \leq 4,$$

$$32x_1 + 30x_2 + 34x_3 \geq 32,$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1,$$

$$x_1 \geq 0,$$

$$x_2 \geq 0,$$

$$x_3 \geq 0.$$

Совокупность выражения целевой функции и ограничений есть математическая постановка шихтовой задачи линейного программирования, которая формулируется следующим образом: требуется отыскать такие неотрицательные  $x_1, x_2$  и  $x_3$ , которые не нарушают ограничения и обращают в минимум функцию  $L$ , линейную относительно этих переменных.

*Задача об использовании ресурсов* такова. Например, предприятие производит алюминиевые сплавы марок  $A, B$ , и  $C$ . В состав сплавов входит алюминий, запас которого не ограничен, и легирующие металлы — кремний, медь, магний, марганец. Запасы легирующих металлов ограничены. Расход легирующих металлов в килограммах на тонну сплава соответствующей марки и их запасы приведены в табл. 5. Там же указана прибыль от реализации в тысячах рублей за тонну каждого сплава.

Требуется определить, в каких количествах следует производить данные сплавы, чтобы прибыль от их реализации была максимальной.

Таблица 5

Исходные данные задачи об использовании ресурсов

Легирующий металл	Затраты легирующего металла на производство сплава, кг/т			Запас металла, кг
	$A$	$B$	$C$	
Кремний	0	10	50	1200
Медь	30	30	20	2800
Магний	60	20	0	2400
Марганец	20	20	0	1000

*Примечание.* Прибыль от реализации сплава, тыс. р./т:  $A - 25$ ;  $B - 14$ ;  $C - 12$ .

Обозначим массы производимых сплавов  $A, B$  и  $C$  соответственно  $x_1, x_2$  и  $x_3$ . Значения этих переменных должны быть неотрицательны.

Прибыль от реализации сплава  $A$  равна  $25x_1$ , сплава  $B$  —  $14x_2$  и сплава  $C$  —  $12x_3$  соответственно, что в сумме дает общую прибыль, являющуюся целевой функцией данной задачи, которую необходимо максимизировать:

$$L = 25x_1 + 14x_2 + 12x_3 \rightarrow \max.$$

Ограничения данной задачи обусловлены запасами легирующих металлов. В частности, расход кремния для производства сплава марки  $A$  равен  $0$  кг, сплава марки  $B$  —  $10x_2$  кг и сплава марки  $C$  —  $50x_3$  кг, общий расход составит  $0 + 10x_2 + 50x_3$  и не должен превышать (может быть меньше или равен) имеющийся запас, равный  $1200$  кг. Аналогично формулируются ограничения по запасам всех остальных легирующих металлов:

$$\begin{aligned} 0x_1 + 10x_2 + 50x_3 &\leq 1200, \\ 30x_1 + 30x_2 + 30x_3 &\leq 2800, \\ 60x_1 + 20x_2 + 0x_3 &\leq 2800, \\ 20x_1 + 20x_2 + 0x_3 &\leq 2800. \end{aligned}$$

К этим ограничениям необходимо добавить требование неотрицательности переменных  $x_1, x_2$  и  $x_3$ :

$$\begin{aligned} x_1 &\geq 0, \\ x_2 &\geq 0, \\ x_3 &\geq 0. \end{aligned}$$

Совокупность выражения для целевой функции  $L$  и ограничений является математической постановкой задачи линейного программирования об использовании ресурсов, которая формулируется следующим образом: требуется отыскать такие неотрицательные  $x_1, x_2$  и  $x_3$ , которые не нарушают ограничения и обращают в максимум функцию  $L$ , линейную относительно этих переменных.

*Транспортная задача линейного программирования* следующая. Пусть имеется 4 поставщика медных концентратов (обогажительные фабрики) и 3 медеплавильных завода для переработки этих концентратов. Требуется организовать перевозку концентрата с обогажительных фабрик на медеплавильные заводы. Все количество медных

концентратов должно быть вывезено от поставщиков и переработано, все медеплавильные заводы должны быть загружены переработкой концентратов. При этом суммарная стоимость перевозки концентратов должна быть минимальной.

Обозначим обогатительные фабрики  $A_1 \dots A_4$ , а медеплавильные заводы  $B_1 \dots B_3$ . Пусть стоимость перевозки одной тонны концентрата от  $i$ -го поставщика к  $j$ -му потребителю составляет  $C_{ij}$ . Такая матрица носит название матрицы стоимости перевозок:

	$b_1$	$b_2$	$b_3$	
$A_1$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$a_1$
$A_2$	$C_{21}$	$C_{22}$	$C_{23}$	$a_2$
$A_3$	$C_{31}$	$C_{32}$	$C_{33}$	$a_3$
$A_4$	$C_{41}$	$C_{42}$	$C_{43}$	$a_4$

Количество тонн концентрата, перевозимого от  $i$ -го поставщика к  $j$ -му потребителю, обозначим как  $x_{ij}$  и запишем в соответствующую матрицу, которая называется матрицей элементов решения:

	$b_1$	$b_2$	$b_3$	
$A_1$	$x_{11}$	$x_{12}$	$x_{13}$	$a_1$
$A_2$	$x_{21}$	$x_{22}$	$x_{23}$	$a_2$
$A_3$	$x_{31}$	$x_{32}$	$x_{33}$	$a_3$
$A_4$	$x_{41}$	$x_{42}$	$x_{43}$	$a_4$

Суммарная стоимость перевозки концентрата от  $A_i$  к  $B_j$  будет

$$L = \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^3 C_{ij} x_{ij} \rightarrow \min.$$

Разумеется, мы желаем достичь минимальной стоимости всех перевозок. Кроме того, все элементы решения — неотрицательные числа  $x_{ij} \geq 0$ .

По условию задачи все концентраты должны быть вывезены от поставщиков

$$\sum_{i=1}^4 x_{ij} \leq a_i$$

и доставлены потребителям

$$\sum_{j=1}^3 x_{ij} \leq b_i.$$

Совокупность описанных выше условий позволяет сформулировать транспортную задачу математически: требуется отыскать такие элементы решения, которые не нарушают ограничения задачи и минимизируют целевую функцию, линейно зависящую от элементов решения. В математической постановке все три задачи формулируются практически одинаково.

### 3.11. Решение задач линейного программирования

---

Рассмотрим решение задачи линейного программирования графическим методом на следующем примере.

Имеется предприятие, производящее два продукта —  $A$  и  $B$ . Продукты отличаются по цене: продукт  $A$  имеет цену 3 у. е. за тонну, продукт  $B$  — 5 у. е. за тонну. Кроме того, производство одной тонны продукта  $A$  требует 3 единиц, а продукта  $B$  — 9 единиц сырья. Запас сырья на предприятии ограничен и составляет 75 единиц. Общее количество продуктов  $A$  и  $B$  не должно превышать 10 т, что обеспечит стабильность цен при их продаже. Производство более дешевого продукта  $A$  не может превышать производство более дорогого продукта  $B$  более чем на 3 т. Расход сырья на производство не может превышать имеющегося запаса в 75 единиц.

С учетом этого сформулируем математически условия задачи. Обозначим как  $x_1$  массу продукта  $A$ , а  $x_2$  массу продукта  $B$  соответственно, тогда целевая функция  $L$  будет определяться следующим выражением:

$$L = 3x_1 + 5x_2 \rightarrow \max.$$

Требуется определить такие  $x_1$  и  $x_2$ , при которых эта функция максимальна.

Из условий задачи вытекает ряд ограничений:

$$x_1 \geq 0,$$

$$x_2 \geq 0,$$

$$3x_1 + 9x_2 \leq 75,$$

$$x_1 + x_2 \leq 10,$$

$$x_1 - x_2 \leq 3.$$

Используем имеющиеся ограничения и вид целевой функции для поиска решения графическим методом.

Поскольку наша задача содержит две неизвестные величины, отведем для них две оси в декартовой системе координат. Обе оси лежат в одной плоскости, которая является пространством переменных.

Первое ограничение задачи  $x_1 \geq 0$  делит пространство переменных на две половины, одна из которых является разрешенным, а другая — запрещенным полупространством. Второе ограничение  $x_2 \geq 0$  также отсекает от пространства переменных разрешенное полупространство. Оба первых ограничения совместны в первом квадранте декартовой плоскости. Заметим, что и на осях переменных ограничения не нарушаются, поскольку ограничения являются нестрогими неравенствами. Разрешенное полупространство покажем на рис. 41 штриховкой.

Третье ограничение задачи  $3x_1 + 9x_2 \leq 75$  в предельном виде можно рассматривать как уравнение прямой в выбранной системе координат:  $3x_1 + 9x_2 = 75$ , или  $x_2 = -1/3x_1 + 25$ . Положение этой прямой показано ниже, на рис. 41. Разрешенное полупространство расположено ниже прямой.

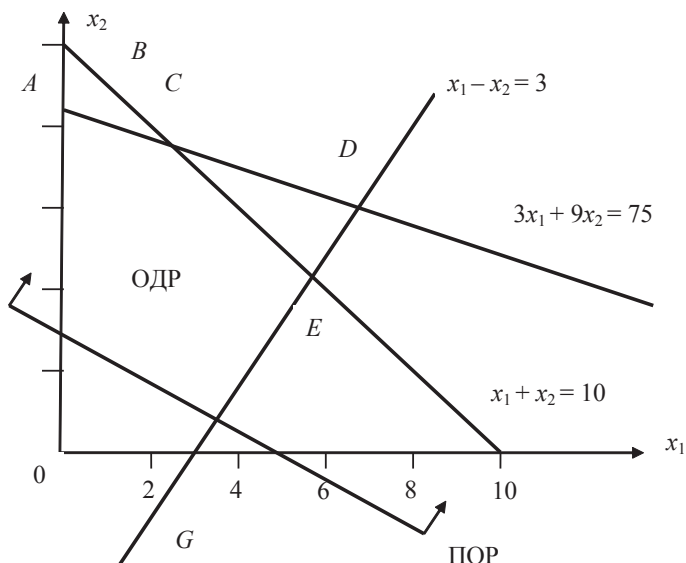


Рис. 41. Графическое решение задачи линейного программирования

Используя оставшиеся ограничения, проведем соответствующие им прямые и покажем разрешенное полупространство для каждой из них.

В результате всех построений на пространстве переменных образуется область, внутри которой и на границах которой совместно выполняются все ограничения данной задачи. Это область  $OACEG$ , имеющая вид пятиугольника, называется *областью допустимых решений* данной задачи. Особенности области допустимых решений (ОДР) вытекают из ограничений задачи.

Любая точка внутри и на границах ОДР, а также на пересечении границ, т. е. в вершинах ОДР, является допустимым решением. Также очевидно, что число допустимых решений бесконечно велико (количество точек в ОДР бесконечно). Нас же интересует оптимальное решение, т. е. такое, при котором целевая функция обращается в максимум.

Следующим этапом решения является поиск оптимального решения на области допустимых решений. Для этого воспользуемся выражением для целевой функции  $L = 3x_1 + 5x_2$ . Зададим произвольное значение  $L$ , пусть, например,  $L = 15$ . Последнее означает, что мы определили в трехмерном пространстве, имеющем ось для отображения целевой функции, некую плоскость, для любой точки которой значение целевой функции неизменно и равно 15 независимо от значений  $x_1$  и  $x_2$ . Выражение  $L = 3x_1 + 5x_2$  определяет положение плоскости целевой функции в выбранной системе координат. Плоскость целевой функции проходит через начало координат и наклонена по отношению к осям переменных. Этот наклон тем больше, чем больше коэффициент при соответствующей переменной.

Выражение  $3x_1 + 5x_2 = 15$  означает, что плоскости в пространстве пересекаются. Линия пересечения плоскости постоянного уровня и плоскости целевой функции есть прямая, проекция ее на пространство переменных также является прямой, которая называется *прямой опорного решения* (ПОР).

В нашей задаче положение ПОР соответствует уравнению прямой  $x_2 = -3/5x_1 + 3$ .

Она отсекает на оси  $x_1$  отрезок, равный 5, а на оси  $x_2$  — 3. Возрастание целевой функции происходит при увеличении  $x_1$  и  $x_2$ , что показано стрелками на ПОР на рис. 41.

Значение 15 мы выбрали произвольно. Если задать большее значение, линия пересечения плоскости целевой функции и плоскости постоянного уровня целевой функции переместится в пространстве параллельно самой себе, а ее проекция переместится параллельно ПОР вправо и вверх.

Нетрудно заметить, что наиболее далеко отстоящей точкой от ПОР является вершина области допустимых решений  $C$ , в которой и будет наибольшее значение целевой функции  $L$ . Эта вершина области является оптимальным решением нашей задачи.

Положение вершины  $C$  определяется решением системы уравнений:

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 &= 10, \\ 3x_1 + 9x_2 &= 75,\end{aligned}$$

что дает координаты  $C(2,5; 7,5)$ . Значение целевой функции при этом равно 45.

Графический метод не может быть использован, если число переменных в задаче больше двух, поскольку пространство переменных становится многомерным, а задача лишается наглядного образа. Для решения подобных задач линейного программирования (а реальные задачи могут содержать сотни переменных) используются иные методы, например, симплекс-метод и метод искусственного базиса.

Алгоритмы методов решения задач линейного программирования известны, исследованы математиками с точки зрения сходимости и наличия решения. На базе имеющихся алгоритмов созданы программы, входящие в пакеты прикладных программ.

В частности, решение задач линейного программирования может быть достигнуто при использовании электронных таблиц Microsoft Excel или математического пакета MathCAD. Наличие таких инструментов упрощает получение решения. Основная сложность состоит в корректной постановке задачи, а также в интерпретации и проверке полученных результатов.



---

## Заключение

---

Ограниченное время, отпущенное для изучения курса «Моделирование процессов и объектов в металлургии», разумеется, недостаточно для того, чтобы дать студентам знания и навыки, необходимые для решения практических задач моделирования и оптимизации металлургических процессов и аппаратов, тем более, что металлургические технологии весьма разнообразны, как и оборудование, в котором они реализуются.

Постановка и решение практических задач моделирования и оптимизации потребует участия специалистов нескольких предметных областей: металлургов, прикладных математиков, программистов. Главная задача курса состояла в том, чтобы дать инженеру-металлургу необходимые знания в области системного анализа, методологии моделирования и математических методов оптимизации металлургических процессов и аппаратов, познакомить с терминологией для успешного диалога со специалистами других профилей, привлекаемых для решения практических задач.

Особое внимание при изложении курса уделено тому обстоятельству, что участие инженера-металлурга в подобной работе просто необходимо: без него никто не может создать эффективно работающую модель и использовать ее для поиска оптимальных условий проведения технологического процесса.

Развитие технологии в металлургии невозможно без использования информационных систем, помогающих персоналу вести технологический процесс наиболее эффективно и безопасно. Важной составляющей таких систем является модельная система поддержки принятия решений. Для большинства металлургических процессов и аппаратов математические модели еще не созданы. Учитывая разнообразие металлургических процессов и аппаратов, видов сырья и получаемых продуктов, можно утверждать, что создание моделей — дело ближайшего будущего.

Реализация этой задачи потребует от металлургов знаний и навыков, полученных при изучении данного курса.

.....

## Контрольные вопросы

---

1. Технологические процессы и объекты как системы: как выделить их из внешней среды? Приведите пример — медеплавильный цех. Какие элементы этой системы вы можете назвать?
2. Как физически организованы вещественные связи между элементами системы, которой является обогатительная фабрика?
3. Какие энергетические связи существуют у такого объекта, как плавильная печь, отапливаемая природным газом?
4. Какие управляющие воздействия существуют для печи Ванюкова?
5. Какие возмущения оказывают влияние на ход металлургического процесса (например, плавки сульфидного сырья)?
6. Какие металлургические процессы заведомо относятся к классу динамических систем?
7. Какие модели процессов (структурные или эмпирические) можно получить, используя методы планирования эксперимента?
8. Какие преимущества имеют модели, основанные на структурном подходе? Каковы недостатки?
9. Почему для большого числа металлургических процессов отсутствуют математические модели? Какие специалисты участвуют в создании моделей металлургических процессов?
10. Если процесс недостаточно изучен, какой подход можно применить для построения его математической модели?
11. Какое практическое значение имеет моделирование равновесия химических реакций применительно к металлургическому процессу, например плавке на штейн? На какие практические вопросы даст ответ модель?
12. На какие практические вопросы даст ответ модель кинетики химических реакций применительно к конвертированию медного штейна?
13. На какие практические вопросы даст ответ моделирование стехиометрии сложной системы химических реакций?

14. Какова роль субъекта моделирования при построении модели процесса?
15. Какие наиболее существенные стороны технологических процессов в металлургии должны найти отражение в модели?
16. По каким критериям оптимальности следует оценивать результат плавки на штейн? Можно ли предложить обобщенный критерий?
17. Можно ли осуществить оптимизацию технологического процесса, не имея математической модели?
18. Почему следует попытаться свести многокритериальную задачу оптимизации к однокритериальной?
19. Какие задачи чаще встречаются на практике: одно- или многофакторные?
20. Что такое пространство переменных (факторов)? Если факторов два или три, то как выглядит это пространство?
21. Что такое область допустимых решений задачи? Чему соответствует оптимальное решение на этой области? Что определяет границы области допустимых решений?
22. В чем преимущество градиентного метода по сравнению с координатным? Всегда ли это преимущество есть?
23. Как выглядит регулярный симплекс, если задача содержит три оптимизирующих фактора?
24. Если используются поисковые методы решения, когда следует прекратить решение и считать его законченным?
25. Что линейно в задачах линейного программирования?
26. Может ли решение задачи линейного программирования находиться внутри области допустимых решений?
27. В каких случаях существует множество оптимальных решений задачи линейного программирования?
28. В каких случаях отсутствует оптимальное решение задачи линейного программирования?
29. Чем транспортные задачи линейного программирования существенно отличаются от других задач линейного программирования? Какие другие задачи вы знаете?
30. В чем отличие методов экспериментальной оптимизации по сравнению с аналитическими и поисковыми методами?
31. Почему аналитические методы оптимизации так редко применяются для решения практических задач?

.....

## Библиографический список

---

Акулич И. Л. Математическое программирование в примерах и задачах / И. Л. Акулич. М. : Высш. шк., 1986.

Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс / Б. Банди. М. : Радио и связь, 1988.

Банди Б. Основы линейного программирования / Б. Банди. М. : Радио и связь, 1989.

Закгейм А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А. Ю. Закгейм. М. : Химия, 1982.

Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии / В. В. Кафаров. М. : Химия, 1985.

Советов Б. Я. Моделирование систем : учебник для вузов / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. 3-е изд., перераб. и доп. М. : Высш. шк., 2007.

Советов Б. Я. Моделирование систем : практикум / Б. Я. Советов, С. Ф. Яковлев. М. : Высш. шк., 1999.

Цымбал В. П. Математическое моделирование металлургических процессов / В. П. Цымбал. М. : Металлургия, 1987.

.....

# Оглавление

---

Введение .....	3
1. Системный анализ .....	5
1.1. Основные понятия и определения системного анализа.....	5
1.2. Внешние связи системы .....	13
1.3. Классификация систем по их свойствам .....	15
2. Моделирование технологических процессов и объектов .....	24
2.1. Основные понятия и определения .....	24
2.2. Алгоритм создания модели .....	29
2.3. Структурный подход для построения математических моделей.....	34
2.4. Использование структурного подхода для составления моделей на молекулярном уровне .....	36
2.5. Описание стехиометрии системы химических реакций.....	36
2.6. Метод направленных графов.....	37
2.7. Матричный метод .....	41
2.8. Моделирование равновесия в системах химических реакций.....	42
2.9. Моделирование кинетики химических реакций .....	45
2.10. Скорость сложной химической реакции.....	48
2.11. Интегрирование уравнений кинетики .....	51
2.12. Численные методы интегрирования .....	52
2.13. Химические реакции в потоке вещества .....	55
2.14. Моделирование явлений тепло- и массопереноса.....	62
2.15. Моделирование тепловых явлений .....	65
2.16. Тепловая работа аппарата с частичным теплообменом.....	66
3. Математические методы оптимизации технологических систем.....	71
3.1. Методы построения обобщенных критериев оптимальности .....	72
3.2. Классификация оптимизационных задач .....	76

3.3. Аналитические методы решения оптимизационных задач.....	78
3.4. Поисковые (численные) методы решения однофакторных оптимизационных задач .....	79
3.5. Поисковые методы решения многофакторных оптимизационных задач .....	82
3.6. Метод координатного спуска .....	87
3.7. Градиентные методы .....	88
3.8. Симплексные методы .....	91
3.9. Экспериментальные методы оптимизации .....	93
3.10. Методы линейного программирования .....	94
3.11. Решение задач линейного программирования .....	99
Закключение.....	103
Контрольные вопросы .....	104
Библиографический список .....	106





**АГЕЕВ НИКИФОР ГЕОРГИЕВИЧ**

кандидат технических наук, профессор кафедры металлургии тяжелых цветных металлов УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина